UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE MATEMÁTICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA APLICADA

A Equação de Poisson-Boltzmann em Regiões com Fronteira Irregular

por

Luciano Bedin

Dissertação submetida como requisito parcial
para a obtenção do grau de

Mestre em Matemática Aplicada

Prof. Dr. Mark Thompson
Orientador

Porto Alegre, Agosto de 2002.

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Bedin, Luciano

A Equação de Poisson-Boltzmann em Regiões com Fronteira Irregular / Luciano Bedin.—Porto Alegre: PPGMAp da UFRGS, 2002.

60 p.: il.

Dissertação (mestrado) —Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2002.
Orientador: Thompson, Mark

Dissertação: Matemática Aplicada
EDP, Espaços de Sobolev, Princípios Variacionais

A Equação de Poisson-Boltzmann em Regiões com Fronteira Irregular

por

Luciano Bedin

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada do Instituto de Matemática da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como requisito parcial para a obtenção do grau de

Mestre em Matemática Aplicada

Linha de Pesquisa: Métodos Analíticos e Numéricos em Dinâmica de Fluidos

Orientador: Prof. Dr. Mark Thompson

Banca examinadora:

Prof. Dr. Marco Antônio Raupp
LNCC

Prof. Dr. Jaime Bruck Ripoll
PPGMAT/IM/UFRGS

Prof. Dr. Paulo Zíngano
PPGMAT/IM/UFRGS

Dissertação apresentada e aprovada em
16 de Agosto de 2002.

Prof. Vilmar Trevisan, Ph.D.
Coordenador

SUMÁRIO

LISTA DE ABREVIATURAS

$W^{m,p}(\Omega)$	espaço de Sobolev
$W_0^{m,p}(\Omega)$	fecho de $C_0^\infty(\Omega)$ em $W^{m,p}(\Omega)$
$\|.\|_{0,p}$	norma L^p
$\|.\|_{1,p}$	norma $W^{1,p}$
$\gamma\psi$	traço de ψ
$vol^n(B)$	volume n dimensional de B
$\bar{K}$	fecho de K
$D\backslash\bar{K}$	complementar de $\bar{K}$ com relação a D
$\int_\Omega^* f(x)d\mu.$	valor médio de f em Ω
$\rightharpoonup$	convergência fraca
∂B	fronteira de B
$\lvert\sigma\rvert$	diâmetro de σ
$u\vert_K$	restrição de u a K
$H^{-1}(\Omega)$	espaço dual de $W_0^{1,2}(\Omega)$

RESUMO

Propomos uma idealização da situação em que uma macromolécula é ionizada em um solvente. Neste modelo a área da superfície da molécula é suposta ser grande com respeito a seu diâmetro. A molécula é considerada como um dielétrico com uma distribuição de cargas em sua superfície. Utilizando as condições de transmissão, a distribuição de Boltzmann no solvente e resultados recentes sobre espaços de Sobolev no contexto de espaços métricos, bem como de integração sobre superfícies irregulares, o problema é formulado em forma variacional. Resultados clássicos do cálculo de variações permitem a resolução analítica do problema.

ABSTRACT

We consider the situation where a macro-molecule is ionized in a solvent. In this model the surface area of the molecule is supposed to be large with respect to its diameter. The molecule is considered as a dielectric with some charge distribution on its surface. Using the transmission conditions, the Boltzmann's distribution in solvent and recent results on Sobolev spaces in the context of metric spaces, as well as of integration on irregular surfaces, the problem is formulated in variational form. Classical results of the variational calculus allow the analytical solution of the problem.

1 INTRODUÇÃO

Fenômenos de ionização em soluções aquosas representam uma questão de interesse central em físico-química. As interações eletrostáticas decorrentes nesse tipo de situação são essenciais a compreensão de muitos processos biológicos. Isso ocorre devido ao fato de que muitas macromoléculas tais como DNA, fosfolipídios e proteínas podem ser consideradas como polieletrólitos ou *polyampholytes* (Grosberg e Khoklov [23], Daune [11]). Isto indica a presença de um grande número de grupos ionizáveis e, como se encontram naturalmente imersos em solvente, tornam-se altamente carregados. Nesse caso, são chamados de poli-íons.

Poli-íons são comuns em sistemas biológicos onde os efeitos do solvente sobre a macromolécula precisam ser conhecidos por um longo período. Nesse sentido é necessária a predição das propriedades eletrostáticas que são observáveis experimentalmente. Situações deste tipo podem ser vistas em Kuhn et al. [30], [31].

No caso particular em que uma macromolécula de DNA (ou seus fragmentos) está imersa num solvente (tipicamente água e NaCl), sabe-se que, sob condições fisiológicas adequadas, cada milhão de torções de hélice envolvendo 10 pares de nucleotídeos de DNA ocupam uma distância linear de menos de 3.4×10^5 μm (0.034 cm) e um volume total de 10^6 nm^3 (10^{-15} cm^3) (de acordo com Alberts et al. [3]). Isso significa que filamentos de DNA podem ser fortemente compactados e assim, pode-se considerar a macromolécula como tendo área de superfície relativamente grande com respeito ao seu diâmetro.

Em termos gerais, os métodos que têm sido utilizados na simulação de fenômenos elétricos em sistemas biológicos podem ser classificados como aqueles que simulam explicitamente todas as moléculas do sistema e aqueles que tratam o solvente e sais via um modelo contínuo. Entre os últimos, o método da equação de Poisson-Boltzmann tem sido utilizado com êxito e em grande escala, devido às melhorias em algoritmos numéricos e desempenho computacional (ver Micu et al. [38]).

A principal vantagem desse método reside na sua velocidade em comparação com métodos perturbativos mais precisos, que requerem largas simulações de dinâmica molecular ou resolução de sistemas de equações integrais não lineares.

Existem pelo menos quatro aplicações maiores da equação de Poisson-Boltzmann ou sua forma linear a saber: cálculo do potencial eletrostático na superfície da biomolécula, dando informação sobre a concentração de pequenos solutos na sua vizinhança; cálculo do potencial eletrostático fora da molécula, dando informação da energia livre de interações de pequenas moléculas em diferentes posições da sua vizinhança; cálculo da energia livre de uma biomolécula ou de seus diferentes estados, dando informação sobre sua estabilidade; e também para cálculo do campo eletrostático que orienta sobre quais forças devem ser utilizadas nos cálculos de dinâmica molecular padrão.

Geralmente, em simulações, tem sido assumido que biomacromoléculas tem baixa constante dielétrica (variando de 2 a 5, conforme Grosberg e Khoklov [23]). Mas algum cuidado tem de ser tomado nesse contexto pois as propriedades físicas de proteínas são, no mínimo, curiosas. A compressibilidade de uma proteína é em torno de 10% a de um fluido mas sua densidade de ocupação (quociente do volume de Van der Waals ao volume realmente ocupado) indica valores, para a maioria das proteínas globulares, entre 0.7 a 0.75, comparável aos valores de 0.7 a 0.8 de cristais de moléculas orgânicas. Não obstante a dinâmica interna e viscosidade aparente de uma proteína não são de um cristal. A termodinâmica de denaturização de proteínas indica um fenômeno similar à transição de uma fase orgânica à água ou que o interior de uma proteína é semelhante a um solvente líquido orgânico. Assim uma proteína pode ser melhor descrita como sendo um líquido denso (detalhes podem ser vistos no livro de Daune [11]). As propriedades elétricas de proteínas também são complexas. A utilização de polarizações eletrônicas e atômicas indicaria para a constante dielétrica um valor de 2 mas levando em conta a estrutura cristalina, isto pode se aproximar de 4. O trabalho de Antosiewics et al. [6] indica valores de aproximadamente 20, os quais compatibilizam melhor simulação e experimentos! Em Micu [38] et al., o valor 2 é utilizado. Do nosso ponto de vista analítico o valor da constante dielétrica é imaterial, mas claramente, em simulações, valores experimentais adequados tem de ser assumidos.

Por outro lado, a constante dielétrica do solvente é naturalmente alta e a interface entre as regiões dielétricas de baixa e alta intensidade tem forma irregular (para resultados em biopolímeros no caso cilíndrico ver Lyubartsev et al. [36] e Tracy e Widow [44]). Isso nos leva a uma situação inviável às teorias de esferas carregadas (Clemmon e Dougherty [9]).

Vamos tratar de uma idealização da situação descrita acima, onde uma macromolécula biológica carregada está imersa num solvente. Para isso faremos uso da já referida equação de Poisson-Boltzmann

$$\nabla.[\epsilon(r)\nabla\Psi(r)] - \kappa^2 \sinh\left(e\Psi(r)/T\right) + \rho_2(r) = 0, \tag{1.1}$$

onde Ψ é o potencial eletrostático na região exterior à macromolécula , ϵ é a constante dielétrica (em geral não uniforme), e é a carga do elétron, T é a temperatura, κ é uma constante adequada, ρ_2 é a densidade de cargas fixas no solvente e $\sinh\left(e\Psi(r)/T\right)$ é a distribuição de Boltzmann para os íons móveis no solvente.

Trataremos de um caso particular em que as constantes dielétricas do solvente e macromolécula são uniformes. Vamos supor também a presença de cargas somente na fronteira da macromolécula, que essas são negativas e que há somente cargas móveis (íons e contra-íons) no solvente. Isso nos permite uma simplificação da equação (1.1), pois nesse caso $\rho_2 = 0$. Detalhes podem ser vistos na Seção 4.1.

Consideremos então uma macromolécula carregada ocupando uma região compacta $\bar{K}$ com fronteira ∂K, tal que há (espacialmente) uma distribuição de cargas concentradas em ∂K. Supomos que $\bar{K} \subset D$, D um subconjunto aberto do $\mathbb{R}^2$ ou do $\mathbb{R}^3$, $\overline{D}$ compacto, ∂D regular. Também vamos supor que as regiões K e $D\backslash\bar{K}$ têm constantes dielétricas k_1 e k_2 (em Micu et al. [38] são utilizados os valores $k_1 = 2$ e $k_2 = 78$, no entanto, com outros objetivos), e que há campos elétricos E_1 e E_2 em K e $D\backslash\bar{K}$, $E_1 = -\nabla\phi_1$ e $E_2 = -\nabla\phi_2$; onde ϕ_1 e ϕ_2 representam o potencial eletrostático em K e $D\backslash\bar{K}$, respectivamente. Uma hipótese necessária é que $dim_B\,(\partial K) = s < \infty$ (ver Definição 3.1.4).

Colocando $\psi_1 = \frac{e\phi_1}{T}$ e $\psi_2 = \frac{e\phi_2}{T}$, (1.1) implica que

$$k_2 \Delta\psi_2 = k_2 r_D^{-2} \sinh\psi_2(x) \qquad em \quad D\backslash\bar{K}. \tag{1.2}$$

Claramente

$$k_1 \Delta\psi_1 = 0 \qquad em \quad K, \tag{1.3}$$

e é natural considerarmos as condições de fronteira

$$*d(k_1\psi_1 - k_2\psi_2) = \frac{4\pi e}{T} w \qquad em \quad \partial K, \tag{1.4}$$

$$\psi_2 = \psi_1 \qquad em \quad \partial K. \tag{1.5}$$

Aqui r é o raio de Debye (Landau e Lifschitz [33]), $*d(k_1\phi_1 - k_2\phi_2)$ é a forma adjunta de $d(k_1\phi_1 - k_2\phi_2)$ (ver Westenholz [46]) e w é uma 1-forma diferencial (w é uma 2-forma no caso tridimensional) relacionada à densidade de cargas em ∂K. A condição (1.4) deve ser coerentemente interpretada num sentido generalizado, como será visto na Seção 4.1. Nessa mesma seção veremos que, admitindo $\psi = 0$ em ∂D (o que implica $\psi \in W_0^{1,2}(D)$), a desigualdade de Poincaré (2.14) é válida em D e isso implicará na coercividade do funcional envolvido. Entretanto, como será visto, essa hipótese não é necessária para garantir a coercividade desse operador e, de fato, em problemas envolvendo eletroforese (ver, por exemplo, Anderson [5]) é natural a consideração de valores não nulos de ψ em ∂D.

A proposta desse trabalho é estudar analiticamente o problema (1.2) a (1.5) utilizando como ferramenta resultados recentes na Teoria de Espaços de Sobolev no contexto de espaços métricos, bem como de teoria de integração sobre regiões com fronteira irregular, abordada especialmente em Harrison e Norton [26]. No caso bidimensional o problema será reduzido a um problema minimizante onde, na forma variacional, serão garantidas as condições de existência e unicidade de soluções. Em três dimensões a formulação é similar. No entanto, devido ao fato de que o funcional $j(.)$ (ver Seção 2.2) não é bem definido em $\mathbb{R}^3$ (como pode ser visto em Glowinski [21], $\exp(u)$ pode não ser bem definido em $L^1(\Omega)$ para todo $u \in W^{1,2}(\Omega)$, $\Omega \subset \mathbb{R}^3$), uma caracterização do domínio de possíveis soluções para o problema é uma questão mais delicada. Nesse caso, o método que será empregado utiliza resultados de Glowinski [21].

Observamos que, como será visto na Seção 4.2.1, tratamos nesta formulação variacional com a minimização do funcional não linear

$$A(\psi) = \frac{k_1}{2}\int_K |\nabla\psi_1|^2 dx + \frac{k_2}{2}\int_{D\setminus\bar{K}} |\nabla\psi_2|^2 dx + k_2 r_D^{-2}\int_{D\setminus\bar{K}} (\cosh\psi_2 - 1)dx - \frac{4\pi e}{T}\int_{\partial K}\psi w.$$

No trabalho de Reiner e Radke [40] pode se ver que o funcional acima pode ser considerado como o negativo do grande potencial

$$\Omega = -pV + \bar{\gamma}S,$$

onde p é a pressão osmótica da concentração eletrólita, S é a área da superfície e $\bar{\gamma}$ é a tensão superficial média (ou excesso de densidade de energia livre na superície) da interface entre solução/molécula. Na literatura, muitas vezes, esse processo é referido como a minimização da energia livre eletrostática de Gibbs ($G = \Psi - TS$). Isso é na melhor das hipóteses um abuso de nomenclatura crasso (referimos o leitor aos trabalhos de Fogolari et al. [17] e Reiner e Radke [40] e Fogolari et al. [16] para uma discussão desta situação confusa e ao livro de Greiner et al. [22] para as noções elementares de Mecânica Estatística).

Algumas considerações devem ser feitas com relação à situação aqui discutida. A primeira diz respeito ao fato de considerarmos macromolécula e solvente como dieletricamente uniformes. De fato poderíamos desejar uma formulação mais complexa, levando em conta, o que é fisicamente mais evidente, a não uniformização da dieletricidade (como é feito, por exemplo em Micu et al. [38] ou em Fogolari et al. [16]). Do ponto de vista matemático isso não nos levaria a uma modificação significativa.

Outra consideração diz respeito ao modelo utilizado. Em diversos trabalhos, entre eles Kuhn et al. [30], [31], é utilizada a aproximação linear $\sinh\phi \sim \phi$.

Fisicamente, quando tratamos de sistemas altamente carregados como, por exemplo DNA, a formulação envolvendo $\sinh\phi$ é mais apropriada. Nesse sentido trataremos da equação (1.2) no caso não linear e uma caracterização variacional para o problema é mais evidente (Micu et al. [38]). Observamos que a equação $\Delta u = \lambda \sinh u$, conhecida como a equação *sinh* de Gordon aparece de forma central na construção de superfícies compactas com curvatura média constante (ver trabalho de Spruck [41] para representações explícitas de soluções).

A irregularidade da superfície da macromolécula é uma outra dificuldade nessa formulação. Resultados recentes (Hajlasz e Martio [24], Hajlasz e Koskela [25], Franchi et al. [18]) em Espaços de Sobolev desenvolvidos no contexto de espaços métricos munidos de uma medida de Borel tratam de questões inerentes à resolução de equações diferenciais parciais em domínios bastante gerais. Nesse sentido, determinados tipos de imersões, traços e extensões podem ser válidos e demonstrados sem utilizar de forma decisiva a geometria da fronteira da região em consideração (o que ocorre com freqüência em formulações mais clássicas). Isso é muito apropriado quando tratamos de regiões com alto grau de irregularidade. Entretanto uma hipótese de regularidade sobre a medida devem ser imposta (ver Teorema 2.1.3).

Essa regularidade exigida sobre a medida decorrerá do fato que vamos considerar ∂K como um espaço métrico munido de uma medida de Borel μ gerada por w. Nesse sentido, apresentamos no Capítulo 3 algumas noções de uma técnica diferenciada de integração sobre regiões cuja fronteira tem um grau relevante de irregularidade mas que, por outro lado, satisfazem uma condição de d-somabilidade (ver Definição 3.1.18). Veremos que nessas condições o Teorema de Gauss-Green é válido.

Finalmente mencionamos que trataremos unicamente com o problema eletrostático sem discutir seu acoplamento com o fluido (solvente). Tal acoplamento está envolvido em uma das mais importantes aplicações em Biofísica: a teoria da eletroforese. Nessa situação uma nuvem de contra-íons cerca a macromolécula. Faz-se uso então, como é visto na literatura (Anderson [5]), da teoria da camada limite de Prandtl para, no contexto do fluido infinito e para a situação em que a densidade de cargas é nula na interface molécula/solvente, introduzir a noção de velocidade de deslizamento $v_s = -constante\ \psi_2 E|^t_{\partial K}$, onde $E|^t_{\partial K}$ é o campo elétrico tangencial em ∂K; junto com a condição de fronteira

$$v = U + \Omega \times r + v_s.$$

Aqui v é a velocidade do fluido na superfície, U é a velocidade translacional do centro de massa da macromolécula e Ω sua velocidade angular (Teubner [43], Long e Ajdari [34], Long et al. [35]). Considerando a macromolécula como um corpo rígido, o tensor de forças hidrodinâmicas e eletrostáticas dá origem a uma força e torque resultantes que são zero, permitindo a preservação da velocidade e velocidade angular da macromolécula. Finalmente, v é calculado via a equação (negligenciando termos inerciais)

$$\eta \Delta v - \nabla p = -\rho E, \qquad e \qquad \nabla . v = 0,$$

onde η é a viscosidade do fluido, p a pressão e ρ é a densidade de cargas, com as apropriadas condições do infinito.

Essa teoria tem sido formulada em termos matemáticos um tanto frouxos e um de nossos objetivos futuros é reformular estas questões para configurações geométricas complexas com a devida generalidade e rigor matemático. Do nosso ponto de vista a resolução analítica e, talvez, computacional desse problema pode fornecer o estado inicial (E, v), $E = -\nabla \phi$ de um problema dinâmico que terá de ser formulado em termos da teoria dos plasmas (de fato, devido às reações de Coulomb existentes, em termos de equações de difusão não lineares na função de distribuição da velocidade v).

O trabalho está organizado como a seguir. Na Seção 2.1 introduziremos resultados preliminares de análise funcional. Como já citamos abordaremos questões inerentes à definição de Espaços de Sobolev no contexto métrico, isso inclui um resultado generalizado de traço, vital à garantia de solução de (1.2) a (1.3). Na Seção 2.2 enunciamos alguns resultados de métodos variacionais que serão utilizados nas seções posteriores. No Capítulo 3 abordaremos alguns aspectos da teoria de integração sobre regiões com fronteira irregular. Finalmente, no Capítulo 4, o problema é formulado e resolvido no espaço funcional $W_0^{1,2}(D)$. Os resultados apresentados nesse capítulo, incluindo a formulação do problema bem como sua resolução, são obtidos de forma original. Mostraremos que é possível definir uma medida em ∂K e considerar essa região como um espaço métrico. Com isso, utilizando a teoria apresentada, bem como resultados de cálculo variacional serão garantidas a existência e unicidade de soluções para o problema minimizante. Reforçamos que os métodos utilizados nos casos bi e tridimensional são diferentes. De fato, a resolução em três dimensões é mais direta, contudo o domínio de possíveis soluções não pode ser precisamente explicitado. Essa é exatamente a vantagem da abordagem em duas dimensões, onde o domínio é caracterizado com o espaço $W_0^{1,2}(D)$.

Agradecemos ao Prof. Jaime B. Ripoll do Instituto de Matemática UFRGS por nos disponibilizar uma cópia do trabalho de Hajlasz e Koskela [25], bem como ao Prof. T. Kist do Departamento de Biofísica-UFRGS e a Claudia E. Thompson por trazerem nossa atenção ao trabalho de Long e Ajdari [34].

2 RESULTADOS DE ANÁLISE FUNCIONAL

Esse capítulo se divide em duas seções. Na primeira, apresentamos alguns resultados provados recentemente sobre espaços de Sobolev definidos em espaços métricos (Hajlasz e Koskela [25], Hajlasz e Martio [24], Franchi et al. [18]), bem como um teorema geral de traço conveniente no contexto de regiões com fronteira irregular. Vamos mostrar que uma caracterização particular de espaços de Sobolev levam-nos à uma definição diferenciada no contexto métrico. Mostramos também que essa caracterização pode ser feita num outro sentido, garantindo que a função de Sobolev em questão satisfaça a inequação p de Poincaré. Essas duas abordagens são similares (Teorema 2.1.2) e a partir delas pode-se desenvolver uma teoria padrão, extensivamente utilizada em áreas correlatas (Teoria de Grafos, Espaços de Carnot-Carathéodory, formas de Dirichlet, etc.). Nosso objetivo aqui é simplesmente apresentar os conceitos essenciais, relacionando as duas formas de abordagem para, em seguida, chegar a um resultado de traço. Algumas demonstrações, excessivamente técnicas, serão omitidas, mas podem ser encontradas nos trabalhos já referidos.

A segunda seção trata de alguns tópicos de cálculo de variações necessários à caracterização variacional do problema bem como à análise da estrutura do operador funcional envolvido, o que vai garantir condições à existência e unicidade de soluções.

2.1 Espaços de Sobolev no Contexto de Espaços Métricos

Se $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ é um conjunto aberto e $1 \leq p \leq \infty$, então o espaço de Sobolev clássico é definido como

$$W^{m,p}(\Omega) = \{u \in L^p(\Omega); D^\alpha u \in L^p(\Omega),\ para\ 0 \leq |\alpha| \leq m\},$$

onde $D^\alpha u$ é a derivada distribucional de u.

Esses espaços são equipados com as normas:

$$\begin{aligned}\|u\|_{m,p} &= \{\sum_{0\leq|\alpha|\leq m}\|D^\alpha u\|_{0,p}^p\}^{1/p} \quad &se \quad 1\leq p<\infty\\ \|u\|_{m,\infty} &= \max_{|\alpha|\leq m}\|D^\alpha u\|_\infty \quad &se \quad p=\infty,\end{aligned}$$

onde $\alpha=(\alpha_1,\alpha_2,...,\alpha_n)$ e $|\alpha|=\sum_{j=1}^n \alpha_j$.

Visando uma definição dos espaços apresentados acima num contexto mais geral abordaremos alguns resultados clássicos particularmente importantes nesse sentido. Iniciamos com dois lemas elementares, o primeiro deles pode ser visto em Hajlasz e Martio [24] e o segundo em Gilbarg e Trudinger [19].

Lema 2.1.1. *Sejam $\gamma>\lambda\geq 0$ e $B=B(R)\subset\mathbb{R}^n$ uma bola de raio R então há uma constante C tal que*

$$\int_B \frac{|g(z)|}{|x-z|^{n-\gamma}}dz \leq C(n,\gamma-\lambda)R^{\gamma-\lambda}M_{2R}^\lambda g(x)$$

para todo $g\in L^1(B)$ e $x\in B$. Aqui $M_R^\lambda g(x)=\sup_{r<R} r^\lambda \int^*_{B(x,r)}|g(z)|dz$

Demonstração. Separamos a integral no lado esquerdo numa soma de integrais sobre "anéis" $B\cap(B(x,\frac{R}{2^{k-1}})\backslash B(x,\frac{R}{2^k}))$. Em cada anel temos $|x-z|^{\gamma-n}\approx(\frac{R}{2^{k-1}})^{\gamma-n}$. Agora estimamos a integral sobre o anel pela integral sobre a bola $B(x,\frac{R}{2^{k-1}})$ e o resultado segue. □

Lema 2.1.2. *Se $B\subset\mathbb{R}^n$ é uma bola e $u\in W^{1,1}(B)$, então*

$$|u(x)-u_B|\leq\frac{|B|^n}{n\ vol^n(B)}\int_B|x-z|^{1-n}|\nabla u(z)|dz \tag{2.2}$$

quase sempre em B.

Demonstração. Utilizando o fato de que $C^\infty(B)\cap W^{1,1}(B)$ é denso em $W^{1,1}(B)$ (Adams [2]), é suficiente estabelecer (2.2) para $u\in C^1(B)$. Assim $\forall x,y\in B$ temos

$$u(x)-u(y)=-\int_0^{|x-y|}D_r u(x+rw)dr, \quad w=\frac{y-x}{|y-x|}.$$

Integrando com relação a y sobre B, temos

$$vol^n(B)(u(x) - u_B) = -\int_B dy \int_0^{|x-y|} D_r u(x + rw)dr.$$

Escrevendo

$$V(x) = \begin{cases} |D_r u(x)| & \text{se } x \in B \\ 0 & \text{se } x \notin B, \end{cases}$$

vê-se que

$$\begin{aligned} |u(x) - u_B| &= \frac{1}{vol^n(B)} \left| \int_B dy \int_0^{|x-y|} D_r u(x + rw)dr \right| \\ &\leq \frac{1}{vol^n(B)} \int_{|x-y|<|B|} dy \int_0^{\infty} V(x + rw)dr \\ &= \frac{1}{vol^n(B)} \int_0^{\infty} \int_{|w|=1} \int_0^{|B|} \rho^{n-1} V(x + rw)d\rho \, dw \, dr \\ &= \frac{|B|^n}{n \, vol^n(B)} \int_0^{\infty} \int_{|w|=1} V(x + rw)dw \, dr \\ &= \frac{|B|^n}{n \, vol^n(B)} \int_B |x - y|^{1-n} |D_r u(y)|dy. \end{aligned}$$

□

Com isso pode-se estabelecer o seguinte resultado, visto em Hajlasz e Martio [24]

Lema 2.1.3. *Seja $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ um domínio limitado com fronteira Lipschitz e $0 \leq \lambda < 1$. Então há constantes $C_1 = C_1(\Omega, \lambda)$ e $C_2 = C_2(\Omega)$ tal que para todo $u \in W^{1,p}(\Omega)$ a inequação*

$$|u(x) - u(y)| \leq C_1 |x - y|^{1-\lambda} (M^{\lambda}_{C_2|x-y|} |\nabla u|(x) + M^{\lambda}_{C_2|x-y|} |\nabla u|(y))$$

verifica-se em quase toda a parte. Aqui supomos $|\nabla u| = 0$ em Ω^c.

Demonstração. Seja $u \in W^{1,p}(\Omega)$. Devido ao fato de Ω ter fronteira Lipschitz há uma constante L (a qual depende somente de Ω) tal que $\forall x, y \in \Omega$ há uma L-bi-Lipschitz aplicação de uma bola $T : B(0, |x-y|) \to \Omega$ tal que $x, y \in T(B(0, |x-y|))$.

Seja $B = B(0, |x-y|)$ e $A = T(B)$. Aplicando o Lema 2.1.2 a $w = u \circ T$ temos a desigualdade abaixo, válida para quase todo $x \in B$

$$|w(x) - w_B| \leq C(n) \int_B \frac{|\nabla w(z)|}{|x-z|^{n-1}} dz.$$

Como a aplicação T é L-bi-Lipschitz, A está contido numa certa bola D com raio $L|x-y|$. Utilizando este fato junto com o Lema 2.1.1, obtemos as estimativas

$$\begin{aligned}
|u(x) - u(y)| &\leq |u(x) - (u \circ T)_B| + |u(y) - (u \circ T)_B| \\
&\leq C \left(\int_D \frac{|\nabla u|(z)}{|x-z|^{n-1}} dz + \int_D \frac{|\nabla u|(z)}{|y-z|^{n-1}} dz \right) \\
&\leq C|x-y|^{1-\lambda} (M^{\lambda}_{2L|x-y|} |\nabla u|(x) + M^{\lambda}_{2L|x-y|} |\nabla u|(y)).
\end{aligned}$$

□

Escolhendo $\lambda = 0$ na desigualdade acima obtemos como corolário que se $u \in W^{1,p}(\Omega)$, onde Ω é um domínio limitado com fronteira Lipschitz ou $\Omega = \mathbb{R}^n$ e $1 \leq p \leq \infty$, então

$$|u(x) - u(y)| \leq C|x-y|(M|\nabla u|(x) + M|\nabla u|(y)).$$

Aqui $Mg(x) = \sup_{r>0} \int^*_{B(x,r)} |g(z)| dz$ é o chamado operador maximal de Hardy-Littlewood e admitimos que $|\nabla u| = 0$ em Ω^c.

Com isso pode-se estabelecer o seguinte resultado, visto em Hajlasz e Martio [24]

Lema 2.1.4. *Se $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ é um conjunto aberto arbitrário e $u \in L^p(\Omega)$ satisfaz*

$$|u(x) - u(y)| \leq |x-y|(g(x) + g(y)) \quad q.s. \tag{2.3}$$

com $g \in L^p(\Omega)$, $g \geq 0$, onde $1 \leq p \leq \infty$, então $u \in W^{1,p}(\Omega)$ e $|\nabla u| \leq 2\sqrt{n}$ q.s.

Uma conseqüência desse lema e do fato que o operador maximal de Hardy-Littlewood é limitado em L^p (Adams [1]) para $1 < p \leq \infty$ é a seguinte caracterização do espaço de Sobolev, cuja demonstração pode ser vista em Hajlasz e Martio [24]

Teorema 2.1.1. *Se $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ é um domínio limitado com fronteira Lipschitz e $1 < p \leq \infty$, então $u \in W^{1,p}(\Omega)$ se e só se há $g \in L^p(\Omega)$, $g \geq 0$, tal que (2.3) se verifique q.s. em Ω. Além disso*

$$\|\nabla u\|_{L^p(\Omega)} \approx \inf_g \|g\|_{L^p(\Omega)}$$

onde o ínfimo é tomado sobre todos os $g \geq 0$ os quais satisfazem (2.3).

Isso nos permite introduzir a noção de espaço de Sobolev sobre um arbitrário espaço métrico munido de uma medida μ pois essa caracterização não envolve a noção de derivada (Franchi et al. [18]).

Definição 2.1.1. *Dado $1 < p \leq \infty$ e a tripla (X, d, μ), onde (X, d) é um espaço métrico e μ é uma medida de Borel em X, definimos o espaço de Sobolev $M^{1,p}(X, d, \mu)$ como o conjunto de todos os $u \in L^p(X)$ para os quais há $0 \leq g \in L^p(X)$ tal que*

$$|u(x) - u(y)| \leq d(x, y)(g(x) + g(y)) \quad q.s. \tag{2.4}$$

Ou seja, há um conjunto $E \subset X$ com $\mu(E) = 0$ tal que (2.4) se verifica para todo $x, y \in X \setminus E$. A função $g \in L^p(X, \mu)$, $g \geq 0$ que satisfaz a inequação (2.4) é denominada *gradiente generalizado* de u. Como pode ser visto em Franchi et al. [18] essa caracterização não é possível para o caso em que $p = 1$.

O espaço $M^{1,p}(X, d, \mu)$ pode ser equipado com a norma de Banach

$$\|u\|_{M^{1,p}} = \|u\|_{L^p(X)} + \inf_g \|g\|_{L^p(X)}, \tag{2.5}$$

onde o ínfimo é tomado sobre o conjunto de todos os $0 \leq g \in L^p(X)$ que satisfazem (2.4). Com essa norma $M^{1,p}(X, d, \mu)$ é completo (Hajlasz e Martio [24]).

É importante observar que se $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ é um domínio limitado com fronteira Lipschitz, o Teorema 2.1.1 estabelece que

$$W^{1,p}(\Omega) = M^{1,p}(\Omega, |.|, \mu),$$

onde $|.|$ é a métrica euclidiana e μ é a medida de Lebesgue. Entretanto, para domínios arbitrários isso não é válido (Hajlasz e Martio [24]).

Agora consideremos X um espaço métrico munido de uma medida de Borel μ e Ω um aberto contido em X.

Definição 2.1.2. *Sejam $u \in L^1_{loc}(\Omega)$ e $g \geq 0$ uma função mensurável. Dizemos que u e g satisfazem a inequação q de Poincaré em Ω se*

$$\int_B^* |u - u_B| d\mu \leq C_q r (\int_{\sigma B}^* g^q d\mu)^{1/q} \tag{2.6}$$

para cada bola B, com $\sigma B \subset \Omega$ e r é o raio de B; $q > 0$, $\sigma \geq 1$ e $C_q > 0$ são constantes fixas.

Observamos que (2.6) é corolário da inequação clássica de Poincaré (ver Proposição 2.2.2) se u é Lipschitziana, $g = \nabla u$ e $q \geq 1$ (arbitrário).

No trabalho de Hajlasz e Koskela [25] a teoria dos espaços de Sobolev no contexto métrico é desenvolvida sistematicamente a partir da inequação (2.6).

Definição 2.1.3. *Dizemos que μ é uma medida doubling num espaço métrico (X, d) se, para toda bola $B \subset X$ de raio r e bola $2B$ com mesmo centro de B e raio $2r$, há uma constante C_d tal que*

$$\mu(2B) \leq C_d \mu(B) \tag{2.7}$$

Se (X, μ) tem a propriedade acima é denominado espaço *doubling*.

A definição dos espaços $M^{1,p}(X, d, \mu)$ está associada à desigualdade (2.6) da seguinte forma (Hajlasz e Koskela [25])

Teorema 2.1.2. *Seja X um espaço doubling. Se $1 < p < \infty$, então as seguintes condições são equivalentes:*

1. *$u \in M^{1,p}(X, d, \mu)$;*

2. *$u \in L^p(X)$ e há $C > 0$, $\sigma \geq 1$, $0 \leq g \in L^p(X)$, e $0 < q < p$ tal que a inequação de Poincaré*

$$\int_B^* |u - u_B| d\mu \leq Cr \left(\int_{\sigma B}^* g^q d\mu \right)^{1/q} \tag{2.8}$$

verifica-se em toda bola B de raio r.

A demonstração utiliza os Teoremas Maximal de Hardy-Littlewood e da Diferenciação de Lebesgue bem como alguns resultados técnicos que fogem dos objetivos aqui delineados.

Abordaremos agora questões referentes à caracterização de traços

Definição 2.1.4. *Seja* $\overline{\Sigma} \subset \mathbb{R}^n$ *um conjunto compacto, para* $u \in W^{1,p}(\mathbb{R}^n) \cap C^0(\mathbb{R}^n)$ *definimos o operador traço como a restrição* $Tr(u) = u|_{\bar{\Sigma}}$.

Um dos problemas centrais na teoria dos espaços $M^{1,p}(X, d, \mu)$ é encontrar um espaço de Banach $\Xi(\bar{\Sigma}, \mu)$ de funções μ mensuráveis tal que o operador traço acima extenda-se a um operador linear limitado

$$T : W^{1,p}(\mathbb{R}^n) \to \Xi(\bar{\Sigma}, \mu).$$

Observamos que $\Xi(\bar{\Sigma}, \mu)$ é único (Hajlasz e Martio [24]) e é normalmente um espaço de Sobolev.

Esse problema é tratado em Hajlasz e Martio [24] onde se desenvolvem as técnicas necessárias à caracterização de teoremas mais gerais de existência de traços em situações envolvendo por exemplo, fractais e subconjuntos do $\mathbb{R}^n$ de dimensão menor que n. Observamos que esses teoremas generalizados utilizam fortemente as propriedades da medida μ em $\bar{\Sigma}$ enquanto que a formulação clássica necessita de mais informação sobre a geometria da fronteira de $\bar{\Sigma}$ (Adams [2]).

Teorema 2.1.3 (Teorema Geral de Traço). *Se* $0 < \lambda < 1$, $1 \leq \frac{(n-d)}{\lambda} < p \leq \frac{n}{\lambda}$ *e* μ *é uma medida de Borel num compacto* $\overline{\Sigma} \subset \mathbb{R}^n$ *tal que* $\mu(B(x, R)) \leq CR^d$ *para todo* $x \in \mathbb{R}^n$ *e todo* $R > 0$, *então há um operador traço limitado*

$$\gamma : W^{1,p}(\mathbb{R}^n) \to M^{1,\frac{dp}{(n-\lambda p)}}(\bar{\Sigma}, |.|^{1-\lambda}, \mu).$$

Para o caso em que $\lambda = 0$ temos o resultado particular

Teorema 2.1.4. *Se* $1 < p < \infty$ *e* μ *é uma medida de Borel suportada num compacto* $\bar{\Sigma} \subset \mathbb{R}^n$ *e tal que* $\mu(B(x, R)) \leq CR^n$ *para todo* $x \in \mathbb{R}^n$ *e todo* $R > 0$, *então há um* *operador traço limitado*

$$\gamma : W^{1,p}(\mathbb{R}^n) \to M^{1,p}(\bar{\Sigma}, |.|, \mu).$$

Sejam o domínio $D \subset \mathbb{R}^2$ e o compacto $\bar{K} \subset D$. Aplicando o Teorema Geral de Traço a

$$W_0^{1,2}(D) \subset W^{1,2}(\mathbb{R}^2),$$

e definindo uma medida de Borel μ em ∂K, é garantida a existência do operador traço linear limitado

$$\gamma : W_0^{1,2}(D) \to M^{1,\frac{d}{1-\lambda}}(\partial K, |.|^{1-\lambda}, \mu), \tag{2.9}$$

onde $1 \leq \frac{2-d}{\lambda} \leq \frac{2}{\lambda}$. Supomos aqui que $0 < \lambda < 1/2 \to 1 < d < 2$.

Para o caso em que $n = 3$, o operador

$$\gamma : W_0^{1,2}(D) \to M^{1,\frac{2d}{3-2\lambda}}(\partial K, |.|^{1-\lambda}, \mu), \tag{2.10}$$

é limitado, para $1 \leq \frac{3-d}{\lambda} < 2 \leq \frac{3}{\lambda}$ e, em especial, para $0 < \lambda < \frac{1}{2} \to 2 < d < 3$.

Na Seção 4.2 será necessária a utilização de um resultado de compacidade para funções em $M^{1,p}(\partial K, |.|^{1-\lambda}, \mu)$. Na formulação clássica o teorema de imersão de Rellich-Kondrachov (Adams [2]) estabelece que, dado um domínio limitado $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ com fronteira suave, o espaço de Sobolev $W^{1,p}(\Omega)$, $1 \leq p < \infty$ é compactamente imerso em $L^q(\Omega)$, onde $q \geq 1$ quando $p \geq n$ e $q < np/(n-p)$ quando $p < n$. Em especial, se Ω é um domínio arbitrário a imersão

$$W_0^{1,1}(\Omega) \to L^1(\Omega) \tag{2.11}$$

é compacta (Gilbarg e Trudinger [19]).

No contexto métrico um resultado relativamente similar é demonstrado em Hajlasz e Koskela [25], utilizando o Teoremas 2.1.2 juntamente com o Teorema Maximal (Adams [1]). Para isso é necessário que a medida μ seja *doubling* em X. Isso garante, por uma simples iteração em (2.7) a existência de um número real positivo η tal que

$$\frac{\mu(B)}{\mu(B_0)} \geq C \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\eta}, \tag{2.12}$$

onde η e C só dependem da constante *doubling* de μ. Aqui B_0 é uma bola arbitrária de raio r_0 e $B = B(x, r)$, $x \in B_0$, $r \leq r_0$.

Teorema 2.1.5. *Sejam, X um espaço doubling, η o número definido acima e $\{u_i, g_i\}$ uma seqüência de pares que satisfazem (2.6) em X para algum $q > 0$. Para B uma bola arbitrária assumimos que $\|u_i\|_{L^1(B)} + \|g_i\|_{L^q(5\sigma B)}$ é limitada. Então há uma subseqüência de $\{u_i\}$ que converge em $L^p(B)$ para cada $1 \leq p < q\eta/(\eta - q)$, quando $q < \eta$ e para cada $p \geq 1$ quando $q \geq \eta$.*

Se X tem diâmetro finito este teorema nos garante o resultado de compacidade para o espaço todo.

2.2 Alguns Tópicos de Métodos Variacionais

Os tópicos abordados nessa seção podem ser vistos com detalhes nos trabalhos a eles referidos. Omitimos a demonstração de alguns resultados por serem ou muito longas ou já bem conhecidas.

Iniciamos com uma versão da desigualdade de Poincaré na versão clássica. De fato, ela é válida para domínios limitados. Uma versão da p-desigualdade de Poincaré também é apresentada. Nesse caso sua validade se dá para domínios limitados e convexos.

De acordo com Gilbarg e Trudinger [19],

Proposição 2.2.1. *Seja $\Omega \in \mathbb{R}^n$, Ω aberto e limitado. Então, para todo $u \in W_0^{1,2}(\Omega)$, a inequação*

$$\|u\|_{0,2}^2 \leq const(\Omega, n)\|\nabla u\|_{0,2}^2 \tag{2.13}$$

é válida.

Claramente, nas condições acima, podemos estabelecer que

$$\|u\|_{1,2}^2 = \|u\|_{0,2}^2 + \|\nabla u\|_{0,2}^2 \leq (1 + const)\|\nabla u\|_{0,2}^2 = c_\Omega \|\nabla u\|_{0,2}^2. \tag{2.14}$$

Proposição 2.2.2. *Seja* $u \in W^{1,p}(\Omega)$, $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, Ω *aberto, limitado e convexo. Então a desigualdade*

$$\|u - \bar{u}\|_{0,p} \leq const(\Omega, n)\|\nabla u\|_{0,p} \tag{2.15}$$

é válida em Ω. *Nesse caso diz-se que* u *e* ∇u *satisfazem a inequação* p *de Poincaré em* Ω.

As seguintes definições podem ser vistas em Kato [28]

- Uma forma sesquilinear a num espaço de Hilbert H é densamente definida se $D(a)$ (o domínio de a) é denso em H;
- a sectorial equivale a fracamente coerciva (Definição 2.2.3) no caso real;
- A subvariedade linear $D \subset D(a)$ é um *cerne* de a se o conjunto de elementos $\{(u,v), a(u,v)\}$ para $(u,v) \in D$ é denso em $G(a) = \{(u,v), a(u,v)\}$;
- Seja a sectorial. Uma seqüência u_n de vetores é dita a-convergente ($u_n \to^a u$) se $u_n \in D(a)$, $u_n \to u$ e $a(u_n - u_m) \to 0$;
- a é dita fechada se $u_n \to^a u$ implica $u \in D(a)$ e $a(u_n - u) \to 0$.

Teorema 2.2.1. *Seja* $a(u,v)$ *uma forma sesquilinear densamente definida, fechada e sectorial no espaço de Hilbert* H. *Então há um operador* T *tal que*

(i) $D(T) \subset D(a)$ *e* $a(u,v) = (Tu, v)$, $\forall u \in D(T)$ *e* $v \in D(a)$*;*

(ii) $D(T)$ *é um cerne de* a*;*

(iii) T *é unicamente determinado.*

As idéias abaixo são encontradas em Zeidler [49] ou em Berger [7]

Definição 2.2.1. *Seja* X *um espaço de Banach e* X' *seu dual. Uma seqüência* $x_n \in X$ *converge fracamente a um elemento* $x \in X (x_n \rightharpoonup x)$ *se*

$$L(x_n) \rightharpoonup L(x),$$

para cada $L \in X'$.

É importante observar que limites fracos, se existirem, são únicos. Além disso,

(a) Se $x_n \to x$, $x_n \rightharpoonup x$ em X;

(b) Se $x_n \rightharpoonup x$ então $\{\|x_n\|\}$ é uniformemente limitado.

Definição 2.2.2. *Seja X um espaço de Banach e F um funcional em $M \subseteq X$. F é dito sequencialmente fracamente semi-contínuo inferiormente num ponto $x \in M$ se e só se*

$$F(x) \leq \liminf_{n\to\infty} F(x_n),$$

para cada seqüência $x_n \in M$ tal que $x_n \rightharpoonup x$.

Lema 2.2.1. *Se $x_n \rightharpoonup x$ em X, (x_n) é limitada.*

Definição 2.2.3. *Um funcional F em $M \subseteq X$, X espaço de Banach, é dito fracamente coercivo em M se $F(x) \to \infty$ quando $\|x\| \to \infty$, com $x \in M$.*

Definição 2.2.4. *Um conjunto C num espaço linear (por exemplo, de Banach) é chamado convexo se e só se $u, v \in C$ e $t \in [0,1]$ implicam $(1-t)u + tv \in C$.*

Definição 2.2.5. *Um funcional F num conjunto convexo $M \subseteq X$, X espaço de Banach, é dito convexo em M se $F((1-t)x + tv) \leq (1-t)F(u) + tF(v)$, $\forall t \in [0,1]$ e $\forall u, v \in M$.*

Definição 2.2.6. *Seja C um subconjunto aberto de um espaço de Banach X. O funcional $F : C \subseteq X \to \mathbb{R}$ é Gateaux-diferenciável se e só se é Gateaux-diferenciável em cada ponto $u \in C$. Isto é, para cada $u \in C$, há um funcional $a \in X'$ tal que*

$$\lim_{t\to 0} \frac{F(u+th) - F(u)}{t} =< a, h >,$$

para todo $h \in X$. Definimos $F'(u) = a$.

Teorema 2.2.2. *Seja $F : C \subseteq X \to \mathbb{R}$ Gateaux-diferenciável sobre C, X espaço de Banach. Suponha que u é a solução do problema minimizante*

$$F(u) = \min! \quad u \in C.$$

Então

(i) Se C é aberto, então u é uma solução da equação $F'(u) = 0$.

(ii) Se C é convexo, então u é uma solução da inequação variacional,

$$< F'(u), v - u > \geq 0,$$

$\forall v \in C$.

Demonstração. (ii) Seja C convexo. Se $F : C \to \mathbb{R}$ tem um mínimo em u, então $\forall 0 < t \leq 1$ e $\forall u, v \in C$ fixos,

$$F(u) \leq F(u + t(v - u)).$$

Isso implica

$$\frac{F(u + t(v - u)) - F(u)}{t} \geq 0.$$

Do fato que F é Gateaux-diferenciável é natural que

$$< F'(u), v - u >= \lim_{t \to 0} \frac{F(u + t(v - u)) - F(u)}{t} \geq 0.$$

(i) Se C é aberto, então a desigualdade acima verifica-se para todo v na vizinhança de u, isto significa que $F'(u) = 0$. $\square$

Teorema 2.2.3. *Seja $F : M \subseteq X \to \mathbb{R}$ um funcional sobre o subconjunto M do espaço de Banach reflexivo X e suponhamos que*

(i) M é convexo, fechado, limitado e não vazio e X é reflexivo;

(ii) F é sequencialmente fracamente semicontínuo inferiormente.

Então F tem um mínimo em M.

Demonstração. Definimos $\alpha = \inf_{u \in M} F(u)$. Então há uma seqüência $\{u_n\}$ em M tal que $F(u_n) \to \alpha$ com $n \to \infty$. Do fato que M é limitado e X é reflexivo, há uma subseqüência $\{u_{n_k}\}$, $u_{n_k} \rightharpoonup u$, $k \to \infty$. M é fechado e convexo. Portanto $u \in M$. Por (ii)

$$F(u) \leq \lim_{n \to \infty} F(u_n) = \alpha.$$

Por outro lado $F(u) \geq \alpha$. Assim, $F(u) = \alpha$. $\square$

Teorema 2.2.4. *Seja F um funcional sobre o subconjunto M como no teorema acima. Suponha que*

(i) M é convexo, fechado e não vazio;

(ii) F é sequencialmente fracamente semicontínuo inferiormente;

(iii) F é fracamente coercivo.

Então F tem um mínimo em M.

Demonstração. Seja $u_0 \in M$. Como $F(u) \to \infty$ quando $\|u\| \to \infty$ podemos encontrar uma bola fechada $B = \{u \in X : \|u\| \leq R\}$ tal que $u_0 \in B \cap M$ e $F(u) \geq F(u_0)$ fora de $B \cap M$. Portanto é suficiente considerar o problema mínimo para F em $B \cap M$. O Teorema 2.2.3 garante o resultado. □

Corolário 2.2.1. *Se $M = X$ e F é Gateaux-diferenciável em X, então o problema $F'(u) = 0$ tem uma solução em X.*

Demonstração. O resultado é uma conseqüência direta do Teorema 2.2.2. □

Consideremos agora um espaço de Hilbert real V com norma $\|.\|$ e produto escalar $(.,.)$ e o seguinte problema associado a V:

Encontrar $u \in V$ tal que u é a solução de

$$a(u, v - u) + j(v) - j(u) \geq L(v - u), \quad \forall v \in V. \tag{2.16}$$

Onde

- $a(.,.) : V \times V \to \mathbb{R}$ é uma forma bilinear contínua, V-elíptica (existe $\alpha > 0$ tal que $a(v, v) \geq \alpha\|v\|^2$, $\forall v \in V$);
- $L : V \to \mathbb{R}$ é um funcional linear contínuo;

- $j(.) : V \to \bar{\mathbb{R}} = \mathbb{R} \cup \{\infty\}$ é um funcional convexo, seqüencialmente fracamente semi-contínuo inferiormente e próprio ($j(v) > -\infty$, $j(v)$ não identicamente infinito, $\forall v \in V$).

Conforme pode ser visto em Glowinski [21],

Teorema 2.2.5. *Se o problema (2.16) tem solução, esta é única.*

Demonstração. Assumimos que u_1 e u_2 sejam duas soluções para (2.16). Dessa forma

$$a(u_1, v - u_1) + j(v) - j(u_1) \geq L(v - u_1) \quad \forall v \in V, \tag{2.17}$$

$$a(u_2, v - u_2) + j(v) - j(u_2) \geq L(v - u_2) \quad \forall v \in V. \tag{2.18}$$

Como $j(.)$ é próprio, há um $v_0 \in V$ tal que $-\infty < j(v_0) < \infty$. Portanto para $i = 1, 2$

$$-\infty < j(u_i) \leq j(v_0) - L(v_0 - u_i) + a(u_i, v_0 - u_i).$$

Isso mostra que $j(u_i)$ é finito para $i = 1, 2$. Portanto, tomando $v = u_2$ em (2.17) e $v = u_1$ em (2.18) e adicionando, obtemos

$$\alpha \|u_1 - u_2\|^2 \leq a(u_1 - u_2, u_1 - u_2) \leq 0.$$

Portanto $u_1 = u_2$. □

Teorema 2.2.6. *O problema (2.16) é equivalente a:*

Encontrar $u \in V$ tal que

$$\begin{aligned} J(u) &= \min! \quad \textit{onde} \\ J(u) &= \frac{1}{2} a(u, u) + j(u) - L(u). \end{aligned} \tag{2.19}$$

Demonstração. Vamos supor, inicialmente, que u é a solução do problema (2.19). Seja $0 < t \leq 1$, então para todo $v \in X$ nós temos

$$J(u) \leq J(u + t(v - u)). \tag{2.20}$$

Coloca $J_0(v) = \frac{1}{2}a(v,v) - L(v)$, então (2.20) torna-se

$$\begin{aligned} 0 &\leq J_0(u + t(v-u)) - J_0(u) + j(u + t(v-u)) - j(u) \\ &\leq J_0(u + t(v-u)) - J_0(u) + t[j(v) - j(u)], \forall v \in V, \end{aligned} \tag{2.21}$$

obtida usando a convexidade de j. Dividindo por t em (2.21) e tomando o limite quando $t \to 0$, obtemos

$$0 \leq (J_0'(u), v-u) + j(v) - j(u), \forall v \in V. \tag{2.22}$$

Como $a(.,.)$ é simétrico, nós temos

$$(J_0'(v), w) = a(v,w) - L(w), \forall v, w \in V. \tag{2.23}$$

De (2.22) e (2.23) obtemos

$$a(u, v-u) + j(v) - j(u) \geq L(v-u), \forall v \in V.$$

Suponha agora que u é uma solução para (2.16). Então para $v \in V$,

$$J(v) - J(u) = \frac{1}{2}[a(v,v) - a(u,u)] + j(v) - j(u) - L(v-u).$$

Mas

$$\begin{aligned} a(v,v) &= a(u + v - u, u + v - u) \\ &= a(u,u) + 2a(u, v-u) + a(u-v, u-v). \end{aligned}$$

Assim

$$J(v) - J(u) = a(u, v-u) + j(v) - j(u) - L(v-u) + \frac{1}{2}a(v-u, v-u).$$

Como u é solução de (2.16) e $a(v-u, v-u) \geq 0$, obtemos

$$J(v) - J(u) \geq 0.$$

$\square$

Em virtude da Definição 2.2.6, é fácil ver que se $a(u,u)$ é simétrico e contínuo e $L(u)$ é contínuo, então ambos são Gateaux-diferenciável.

O teorema abaixo será utilizado no Capítulo 4 e pode ser visto em Zeidler [48]

Teorema 2.2.7. *Seja V um espaço de Hilbert real e $a : V \times V \to \mathbb{R}$ uma forma bilinear, positiva, contínua e simétrica. Então $a(u,u)$ é fracamente sequencialmente semicontínua inferiormente.*

Demonstração. Seja $u \in V$ fixo. Colocando

$$b(v) = a(u,v), \forall v \in V,$$

$b \in V'$, pois $|b(v)| \leq c\|u\|\|v\|$. Assim, $u_n \rightharpoonup u$ com $n \to \infty$ implica $b(u_n) \to b(u)$, isto é,

$$\lim_{n\to\infty} a(u_n,u) = a(u,u).$$

Do fato que $a(u-u_n, u-u_n) \geq 0$,

$$a(u,u) \leq a(u_n,u_n) + 2a(u,u) - 2a(u_n,u).$$

Fazendo $n \to \infty$, $a(u,u) \leq \liminf_{n\to\infty} a(u_n,u_n)$. □

Uma formulação particular útil na discussão do problema no caso tridimensional é mostrada a seguir. Consideremos $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ um domínio limitado e $V = W_0^{1,2}(\Omega)$. Seja $\phi : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $\phi \in C^0(\mathbb{R})$, ϕ não-decrescente, $\phi(0) = 0$ e

$$\Phi(t) = \textstyle\int_0^t \phi(\tau)d\tau, \quad t \in \mathbb{R}, \tag{2.24}$$

$$D(\Phi) = \{v \in V, \Phi(v) \in L^1(\Omega)\}.$$

Definimos o funcional $j(.) : L^2(\Omega) \to \bar{\mathbb{R}}$ como

$$\begin{aligned} j(v) &= \int_\Omega \Phi(v)dx \quad se \quad \Phi(v) \in L^1(\Omega) \\ j(v) &= +\infty \qquad\quad\ \ se \quad \Phi(v) \notin L^1(\Omega). \end{aligned} \tag{2.25}$$

Como $\phi : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ é não decrescente e contínuo com $\phi(0) = 0$, nós temos $\Phi \in C^1(\mathbb{R})$, Φ é convexo, $\Phi(t) \geq 0$, $\forall t \in \mathbb{R}$.

É possível mostrar que o problema (2.19), onde $j(.)$ é definido da forma acima, tem solução em $V \cap D(\Phi)$ e esta é única. Como já vimos, isso é equivalente a garantir a existência e unicidade para o problema (2.16). A existência de soluções decorre dos resultados abaixo, discutidos detalhadamente em Glowinski [21]

Lema 2.2.2. *O funcional $j(.)$ como em (2.25) é convexo, próprio e seqüencialmente fracamente semi-contínuo inferiormente em $L^2(\Omega)$.*

Demonstração. Desde que $j(v) \geq 0$, $\forall v \in L^2(\Omega)$, segue que $j(.)$ é próprio. A convexidade de $j(.)$ é óbvia do fato que Φ é convexa.

Vamos provar que $j(.)$ é seq. fracamente semi-contínuo inferiormente. Seja $\{v_n\}_n$, $v_n \in L^2(\Omega)$, tal que

$$\lim_{n\to\infty} v_n = v$$

fortemente em $L^2(\Omega)$.

Mostraremos que

$$\liminf_{n\to\infty} j(v_n) \geq j(v). \tag{2.26}$$

Se $\liminf\limits_{n\to\infty} j(v_n) = +\infty$, a propriedade está provada. Assim, assumimos que

$$\liminf_{n\to\infty} j(v_n) = l < +\infty.$$

Podemos extrair uma subsequência $\{v_{n_k}\}_{n_k}$ tal que

$$\lim_{k\to\infty} j(v_{n_k}) = l, \tag{2.27}$$

$$v_{n_k} \to v \quad q.s. \quad em \quad \Omega. \tag{2.28}$$

Como $\Phi \in C^1(\mathbb{R})$, (2.28) implica

$$\lim_{k\to\infty} \Phi(v_{n_k}) = \Phi(v) \quad q.s. \tag{2.29}$$

Além disso, $\Phi(v) \geq 0 \quad q.s.$ e (2.27) implica que

$$\{\Phi(v_{n_k})\}_k \tag{2.30}$$

é limitada em $L^1(\Omega)$.

Pelo Lema de Fatou, (2.29) e (2.30) nós temos

$$\Phi(v) \in L^1(\Omega),$$

$$\liminf_{k\to\infty} \int_\Omega \Phi(v_{n_k})dx \geq \int_\Omega \Phi(v)dx. \tag{2.31}$$

De (2.27) e (2.31) obtemos (2.26). □

Como conseqüência,

Corolário 2.2.2. *O funcional $j(.)$ restrito a V é convexo, próprio, e seq. fracamente semi-contínuo inferiormente.*

De acordo com o Teorema 2.2.5 e argumentos técnicos adicionais (Glowinski [21]) os seguintes resultados são válidos

Teorema 2.2.8. *Com as hipóteses acima em V, $a(.,.)$, $L(.)$ e $\phi(.)$, o problema (2.16) tem uma solução em $V \cap D(\Phi)$ e esta solução é única .*

Teorema 2.2.9. *O problema (2.16) é equivalente a:*

Encontrar $u \in V$ tal que

$$a(u,v) + < \phi(u), v > = L(v), \quad \forall v \in V \quad e \quad \phi(u) \in L^1(\Omega) \cap H^{-1}(\Omega). \tag{2.32}$$

3 O TEOREMA DE GAUSS-GREEN EM REGIÕES COM FRONTEIRA IRREGULAR

Nesse capítulo apresentamos algumas questões referentes ao grau de irregularidade de ∂K. Sob apropriadas condições geométricas sobre ∂K, valida-se o teorema de Gauss-Green

$$\int_{\partial K} w = \int_K dw,$$

para formas w às quais as integrais acima fazem sentido.

Esse resultado foi estabelecido em Harrison e Norton [26] para regiões com fronteira d-somável (Definição 3.1.18). Aqui vamos assumir que ∂K tem dimensão $box - counting$ (Falconer [15]) finita e igual a s. Como conseqüência, ∂K é d-somável, para todo d tal que $s \leq d < 2$. Também $dim_H(\partial K) \leq s$, onde $dim_H(\partial K)$ é a dimensão de Hausdorff de ∂K.

Embora não utilizemos diretamente o Teorema de Gauss-Green no tratamento do problema em questão, ele torna-se imprescindível quando tratamos do problema dinâmico (ver Long e Ajdari [34]).

O capítulo se divide em duas seções. Na primeira, apresentamos algumas noções da teoria geométrica envolvida. Isso fornecerá o embasamento teórico para a teoria construtiva de integração sobre regiões irregulares, apresentada na segunda seção. Apresentaremos algumas noções básicas da teoria envolvida, à qual é intensivamente explorada, por exemplo em Whitney [45]. O capítulo é baseado nos trabalhos de Harrison e Norton [26], Falconer [15] e Whitney [45].

3.1 Teoria Geométrica

Definição 3.1.1. *Seja F um subconjunto do $\mathbb{R}^n$. Definimos $H^s(F)$, a medida exterior de Hausdorff s-dimensional para F, como sendo*

$$H^s(F) = \lim_{\delta \to 0} \inf\{\Sigma_{i=1}^{\infty} |U_i|^s : |U_i| < \delta,\ F \subset \bigcup_{i=1}^{\infty} U_i\}.$$

Esta medida exterior define, pelo procedimento de Caratheodory (Evans e Gariepy [14]) uma σ-álgebra de conjuntos $F \subseteq \mathbb{R}^n$ mensuráveis com respeito a $H^s(F)$.

Definição 3.1.2. *A dimensão de Hausdorff de $F \subset \mathbb{R}^n$ é dada por*

$$dim_H\ F = \inf\{s : H^s(F) = 0\}.$$

Definição 3.1.3. *Sejam $F \subset \mathbb{R}^n$, F limitado, e $N_F(\epsilon)$ o menor número de ϵ-bolas necessárias para cobrir F. Então definimos as dimensões $box - counting$ inferior e superior de F como sendo*

$$\underline{dim_B}\ F = \lim_{\epsilon \to 0} \inf \frac{\log N_F(\epsilon)}{-\log(\epsilon)}$$

e

$$\overline{dim_B}\ F = \lim_{\epsilon \to 0} \sup \frac{\log N_F(\epsilon)}{-\log(\epsilon)},$$

respectivamente.

Definição 3.1.4. *A dimensão $box - counting$ de F é dada por $dim_B\ F = \underline{dim_B}\ F = \overline{dim_B}\ F$ quando essa igualdade for possível.*

Como pode ser visto em Falconer [15], em geral, $dim_H\ F \leq dim_B\ F$.

Definição 3.1.5. *Um espaço afim E, de dimensão n, é um sistema composto de um conjunto de pontos P, um espaço vetorial $V = V(E)$ de dimensão n, e operações $p + v$ de V em E, chamadas translações, com as seguintes propriedades*

(1) $(p + u) + v = p + (u + v)$

(2) $p + O = p$

(3) $p + v \neq p$ *se* $v \neq O$

(4) Para cada p *e* q *há um* v *tal que* $p + v = q \Rightarrow q - p$ *é bem definido.*

Definição 3.1.6. *Um subconjunto* E' *de um espaço afim* E *é um subespaço afim de* E *se há um subespaço vetorial* V' *de* $V(E)$ *tal que as operações* $p' + v'(p' \in E',\ v' \in V')$ *tornam* E' *afim, com* $V' = V(E')$*.*

Definição 3.1.7. *Os pontos* $p_1, p_2, ..., p_k$ *são ditos dependentes se estão contidos num subespaço afim de* E *de dimensão menor que* k*. Caso contrário, são ditos independentes.*

Definição 3.1.8. *Um espaço semi-fechado de um espaço afim* E *de dimensão* n *é o conjunto de pontos que se localizam num lado dado de um subespaço afim* P *de* E*, de dimensão* $n - 1$*, juntamente com* P*.*

Alguns conceitos na geometria dos espaços afim:

- Uma célula σ é um conjunto não vazio (limitado e fechado) expressível como uma intersecção de um número finito de espaços semi-fechados;

- O plano $P(\sigma)$ de σ é o menor subespaço afim contendo σ. A dimensão $dim(\sigma)$ de σ é a dimensão de $P(\sigma)$.

- O interior de σ é a diferença $\sigma - \partial\sigma$, onde $\partial\sigma$ é a fronteira de σ (Definição 3.1.12) . Se $dim(\sigma 1) = dim(\sigma 2)$, dizemos que $\sigma 1$ e $\sigma 2$ não se interceptam se $int(\sigma 1) \cap int(\sigma 2) \neq \emptyset$.

- Pode-se expressar $\partial\sigma$ como uma união finita de $n - 1$-células as quais são denominadas as $(n - 1)$-faces de σ.

- Os vértices de σ são faces de dimensão 0. As arestas de σ são as $1-faces$ de σ. Se $p_0, p_1, ..., p_r$ são os vértices de σ, então σ é o menor conjunto convexo o qual contém esses pontos. Os pontos de σ são expressíveis na forma

$$p = \mu_0 p_0 + \mu_1 p_1 + ... + \mu_r p_r \tag{3.1}$$

cada $\mu_i \geq 0$, $\Sigma \mu_i = 1$.

Definição 3.1.9. *Um simplexo σ em E é um conjunto de pontos expressível na forma (3.1), os p_i sendo independentes. Logo dim $\sigma = r$ e (3.1) é uma expressão única. Escrevemos $\sigma = p_0 p_1 ... p_r$. Um simplexo orientado $\sigma = p_0 p_1 ... p_r$ é um simplexo com orientação de acordo com o conjunto de vetores $(p_1 - p_0, ...p_r - p_0)$, ou equivalentemente, $(p_1 - p_0, ...p_r - p_{r-1})$ e com essa orientação será denotado $\sigma =< p_0, p_1, ...p_r >$.*

Definição 3.1.10. *Considere σ_i, $i = 1, 2, ...$ simplexos no $\mathbb{R}^n$ não interceptos. A expressão $A = \Sigma a_i \sigma_i$ determina o que chamamos de n-cadeia poliédrica no $\mathbb{R}^n$.*

Para nossos objetivos é necessário que cadeias poliédricas sejam independentes de subdivisões (uma discussão detalhada sobre subdivisões pode ser vista em Whitney [45]). Para isso definimos a função $A(p)$ que assume valor a_i ou $-a_i$ para p no *int* σ_i com a condição de que σ_i seja orientado + ou − de acordo com a orientação padrão do $\mathbb{R}^n$ e *zero* para p fora do interior do simplexo σ_i.

Observamos que se $\Sigma_j \tau_{ij}$ é uma subdivisão de σ_i as cadeias poliédricas $\Sigma_i a_i \sigma_i$ e $\Sigma_i \Sigma_j \tau_{ij} \sigma_i$ são as mesmas se pudermos definir classes de equivalência apropriadas.

De fato definimos como equivalentes cadeias A e B as quais a função $A(p)$ e $B(p)$ são iguais, exceto, possivelmente, num número finito de células de dimensão menor do que n. Denominamos o conjunto dessas classes de equivalência como P_n. Os elementos de P_n são as n-cadeias poliédricas no $\mathbb{R}^n$.

P_n é um espaço linear pelas definições

$$aA = aA(p)$$

e

$$A + B = A(p) + B(p).$$

Por exemplo, se $A = \Sigma_i a_i \sigma_i$ e $B = \Sigma_i b_i \tau_i$ então $aA = \Sigma_i a a_i \sigma_i$ e $A + B = \Sigma_i (a'_i + b'_i)\mu_i$, onde μ_i é uma subdivisão comum de A e B (a existência de tal subdivisão é mostrada em Whitney [45]), ou seja, $A = \Sigma a'_i \mu_i$ e $B = \Sigma b'_i \mu_i$.

Definição 3.1.11. *Para $m < n$, uma m-cadeia poliédrica no $\mathbb{R}^n$ é um conjunto finito de m-planos orientados no $\mathbb{R}^n$, junto com uma m-cadeia poliédrica em cada. Denotamos o espaço dessas m-cadeias por P_m.*

Definição 3.1.12. *A fronteira de um n-simplexo $\sigma =< p_0, p_1, ..., p_r >$ é definida como uma $(n-1)$-cadeia poliédrica*

$$\partial\sigma = \Sigma(-1)^i < p_0, ..., p_1^i, ..., p_n > .$$

Consideremos agora $\sigma =< p_0, p_1, ..., p_m >$ um m-simplexo no $\mathbb{R}^n$ e w uma m-forma, podemos definir $\int_\sigma w$ no sentido de Riemann, ou mais geralmente, no sentido de Lebesgue, da seguinte maneira.

Colocando $\tau_m =< 0, e_1, e_2, ..., e_m >$ e escolhendo uma parametrização afim $\phi : \tau_m \to \sigma$, $\phi(e_i) = p_i$, $i = 1, ..., m$, podemos definir

$$\int_\sigma w = \int_{\tau_m} w(\phi(s))(D\phi(s)e_1, ..., D\phi(s)e_m) ds_1 ds_2 ... ds_m.$$

Nesse sentido, para uma cadeia poliédrica $A = \Sigma c_i \sigma_i$ temos

$$\int_A = \Sigma c_i \int_{\sigma_i} w.$$

Definição 3.1.13. *Uma m-forma no $\mathbb{R}^n$ é m-mensurável se, para cada m-simplexo afim σ em $\mathbb{R}^n$ com parametrização afim $\phi : \tau_m \to \sigma$, a função*

$$w(\phi(s))(D\phi(s)e_1, ..., D\phi(s)e_m)$$

é mensurável em τ_m.

Definição 3.1.14. *Para $0 < d \leq m$, a d-massa $M_d(A)$ de uma cadeia m-poliédrica no $\mathbb{R}^n$ é dada por*

$$M_d(A) = \inf\{\Sigma|a_i||\sigma_i|^d : A = \Sigma a_i\sigma_i\}.$$

M_d define uma norma em P_m (Harrison e Norton [26]). No caso particular em que $d = m$, $M_d(A) \approx vol^m(A)$.

Definição 3.1.15. *Para $n-1 < d \leq n$, definimos a norma d-flat $|A|_d$ da $(n-1)$-cadeia poliédrica A como*

$$|A|_d = \inf\{M_{n-1}(S) + M_d(T) : A = S + \partial T\}.$$

Claramente $|A|_d$ define uma semi-norma em P_{n-1}. Temos de provar que ela é de fato uma norma. Para isso, dado $A \neq 0$, escolhemos uma $(n-1)$-forma $w \in C^\infty$ tal que $\int_A w \neq 0$. Então $|A|_d \neq 0$, devido ao seguinte lema cuja prova pode ser vista em Harrison e Norton [26].

Lema 3.1.1. *Se $A \in P_{n-1}$ tem seu suporte numa esfera de raio $r \geq 1$ e w é uma $(n-1)$-forma suave, então*

$$\left|\int_A w\right| \leq r|w|_{C^1}|A|_d.$$

Assim $|A|_d$ define uma norma em P_{n-1} e M_d é uma norma em P_n.

Definimos Ξ_d o completamento de (P_n, M_d) e C_d o completamento de $(P_{n-1}, |.|_d)$. Nesse contexto o operador fronteira $\partial : P_n \to P_{n-1}$ satisfaz

$$|\partial A|_d \leq M_d(A), \tag{3.2}$$

e assim extende-se a um único operador linear limitado $\partial : \Xi_d \to C_d$ satisfazendo a mesma inequação.

Definição 3.1.16. *Considere w uma $(n-1)$-forma-$(n-1)$-mensurável em $\mathbb{R}^n$. Dizemos que w pertence ao espaço de d-flat-$(n-1)$-formas, e denotamos esse espaço por F^d, se*

$$|w|^d = \inf\{c : \left|\int_A w\right| \leq c|A|_d\} < \infty.$$

Dessa definição $\left|\int_A w\right| \leq |A|_d |w|^d$, $\forall A \in P_{n-1}$, $w \in F^d$ e em virtude dessa desigualdade, o operador bilinear $\int : P_{n-1} \times F^d \to \mathbb{R}$ extende-se unicamente a $C_d \times F^d$ satisfazendo a mesma inequação. Denotamos esse operador extendido por $\int^\flat$. Essa definição é equivalente a $\int_A^\flat w = \lim \int_{A_k} w$, onde $A \in C_d$ e $\{A_k\}$ é qualquer seqüência de $(n-1)$-cadeias poliédricas tendendo a A na $|.|_d$-topologia. Claramente esse limite existe e é independente da seqüência $\{A_k\}$ escolhida.

Tendo definido integração sobre o espaço C_d é natural pensarmos na identificação de uma fronteira geométrica $\partial\Omega$ com um único elemento $(\partial\Omega)^\flat \in C_d$ e então, nesse caso podemos simplesmente definir $\int_{\partial\Omega}$ a ser $\int_{(\partial\Omega)^\flat} w$. O método utilizado em Harrison e Norton [26] consiste em identificar Ω com um elemento $\Omega^\flat$ de Ξ_d, e então $(\partial\Omega)^\flat$ será $\partial(\Omega)^\flat$. Vamos descrever brevemente esse método começando com algumas definições.

Definição 3.1.17. *Um domínio de Jordan Ω em $\mathbb{R}^n$ é um subconjunto aberto conexo limitado e orientado cuja fronteira é uma hipersuperfície topológica compacta.*

O método citado utiliza a decomposição de Whitney para Ω a qual descreveremos a seguir.

Um cubo Q é chamado um k-cubo se é da forma

$$[l_1 2^{-k}, (l_1+1)2^{-k}] \times ... \times [l_n 2^{-k}, (l_n+1)2^{-k}]$$

onde k, $l_1, ..., l_n$ são inteiros.

Quando Ω é limitado, há um menor k_0 tal que para algum k_0-cubo e todos os seus vizinhos estão contidos em Ω. Podemos então definir indutivamente W^k como sendo a coleção de todos os k-cubos $Q \subset \Omega$ satisfazendo

(a) todo k-cubo tocando Q está contido em Ω, e

(b) Q não está contido em qualquer cubo em W^j para $j < k$.

Seja $\widetilde{W} = \bigcup_{k_0}^{\infty} W^k$. $\widetilde{W}$ é a chamada decomposição de Whitney para Ω.

Ela é válida no sentido de que podemos definir uma aproximação para Ω dada pela seguinte seqüência

$$\mathsf{W}_k = \Sigma\{\tau \in \widetilde{W} : \tau \in W^j \; para \; algum \; j \leq k\} \in P_n. \tag{3.3}$$

Sendo assim definimos $\Omega^\flat \equiv \lim \mathsf{W}_k \in \Xi_d$ e temos de mostrar que esse limite de fato existe sob apropriadas hipóteses geométricas sobre Ω.

Definição 3.1.18. *O conjunto limitado $X \subset \mathbb{R}^n$ é d-somável se a integral imprópria $\int_0^1 N_X(x)x^{d-1}dx$ converge.*

Proposição 3.1.1. *Seja $X \subset \mathbb{R}^n$ tal que $dim_B(X) < d$ então X é d-somável.*

Demonstração. Se $dim_B\ X < d$ então $N_X(\epsilon) \leq O(\epsilon^{-d'})$, para $dim_B\ X < d' < d$. □

A seguinte proposição justifica essas definições

Proposição 3.1.2. *Se Ω é um domínio de Jordan em $\mathbb{R}^n$ e $\partial\Omega$ é d-somável, então $\Omega^\flat \equiv \lim \mathsf{W}_k$ existe em Ξ_d.*

A demonstração decorre do seguinte lema auxiliar

Lema 3.1.2. *Se Ω é um subconjunto aberto limitado do $\mathbb{R}^n$ e $\partial\Omega$ é d-somável, então a soma $\Sigma_{Q\in\widetilde{W}} |Q|^d$ da decomposição de Whitney de Ω é finita.*

Demonstração. Escrevemos $N = N_{\partial\Omega}$. Da definição de $\widetilde{W}$, cada k-cubo Q de $\widetilde{W}$ está contido num $(k-1)-$cubo Q' que toca um $(k-1)$-cubo Q'' que encontra $\partial\Omega$. (Caso contrário, Q' deveria estar em $\widetilde{W}$ e não Q). O número de tais cubos Q'' é controlado por $N(2^{-k+1}) \leq 2^n N(2^{-k})$, e portanto o número de cubos Q é controlado por *const* $N(2^{-k})$.

A d-soma dos k-cubos de $\widetilde{W}$ é assim menor do que $C(n)N(2^{-k})2^{-kd}$, onde $C(n)$ é alguma constante dependendo somente sobre n.

Isso significa que a d-soma de $\widetilde{W}$ é finita se

$$\sum_{k=k'}^{\infty} N(2^{-k})2^{-kd} < \infty,$$

onde $2^{-k'}$ é o tamanho do maior cubo em $\widetilde{W}$.

Isso é verdade se e só se $\int_0^\infty N(2^{-z})2^{-dz}dz < \infty$, e isso, por meio da mudança de variável $x = 2^{-z}$, é nossa hipótese. $\square$

Demonstração da Proposição 1. Pelo Lema 3.1.2, $\Sigma_{Q\in\widetilde{W}}|Q|^d < \infty$. Portanto, se $k < j$,

$$M_d(\mathsf{W}_k - \mathsf{W}_j) \leq \Sigma_{i=k+1}^{j}\Sigma_{Q\in W^i}|Q|^d \to 0$$

com $k \to \infty$. Isso significa que a seqüência W_k em P_n é $M_d - Cauchy$ e então converge a algum elemento de Ξ_d. $\square$

3.2 Teoria de Integração

Definição 3.2.1. *Se Ω é um domínio de Jordan com fronteira d-somável e $w \in F^d$ definimos*

$$\int_{\partial\Omega} w = \int_{\partial(\Omega^\flat)}^{\flat} w$$

no sentido de que $\int_{\partial\Omega} w$ pode ser calculada como $\lim \int_{\partial \mathsf{W}_k} w$.

A garantia de que essa forma de integração é bem definida passa pelos seguinte resultado

Teorema 3.2.1. *Seja $n-1 < d \leq n$. Se w é $H^{n-1} - q.s.$ igual a uma $(d-n+1)$-Hölder forma, e Ω é um domínio de Jordan em $\mathbb{R}^n$ tal que $\partial\Omega$ é d-somável, então $\int_{\partial\Omega} w = 0$ se $w|_{\partial\Omega} = 0$.*

Demonstração. Assumimos que w é $(d-n+1)$-Hölder e que $w|_{\partial\Omega} = 0$.

Supomos que $\partial\mathsf{W}_k$ representa uma união finita de PL-$(n-1)$-variedades aproximando $\partial\Omega$ na métrica de Hausdorff. Para $x \in \partial\mathsf{W}_k$, $Q \in W^k$ um cubo contendo x, e $p \in \partial\Omega$ qualquer ponto minimizando a distância de x a $\partial\Omega$, temos

$$|w(x)| = |w(x) - w(p)| \leq |w|_{d-n+1}|x-p|^{d-n+1} \leq C|w|_{d-n+1}|Q|^{d-n+1}$$

para alguma constante C dependendo sobre n.

Se S denota uma $(n-1)$-face de $\partial\mathsf{W}_k$ e $Q \in W^k$ é o k-cubo contendo S, nós temos

$$\left|\int_S w\right| \leq C|w|_{d-n+1}|Q|^{d-n+1}vol^{n-1}(S) \leq C|w|_{d-n+1}|Q|^d.$$

Cada face de $\partial\mathsf{W}_k$ é uma das $2n$ face de algum $Q \in W^k$. Assim

$$\left|\int_{\partial\mathsf{W}_k} w\right| \leq 2nC|w|_{d-n+1}\Sigma_{Q\in W^k}|Q|^d \to 0$$

quando $k \to \infty$. □

Como conseqüência podemos estabelecer

Teorema 3.2.2. *Se w é H^{n-1} igual a uma forma Lipschitz e Ω é qualquer domínio de Jordan em $\mathbb{R}^n$ (mesmo com medida da fronteira positiva), então*

$$w|_{\partial\Omega} = 0 \quad \textit{implica} \quad \int_{\partial\mathsf{W}_k} w \to 0$$

onde W_k é a aproximação poliédrica determinada pela decomposição de Whitney de Ω.

Demonstração. A decomposição de Whitney de qualquer região limitada é sempre n-somável. O resultado segue repetindo a prova do Teorema 3.2.1 com $d = n$. □

Em uma variável o teorema fundamental de cálculo é válido para as funções que são absolutamente contínuas. A definição a seguir é motivada por essa idéia.

Definição 3.2.2. *Uma função f é ACL (absolutamente contínuas por linhas) em um domínio Ω se, em cada retângulo fechado $R \subset \Omega$, f é absolutamente contínua* *como uma função de uma variável quando restrita a quase toda linha paralela a cada eixo coordenado. Uma forma é ACL se cada uma de suas funções componentes é ACL.*

Definição 3.2.3. *Denotamos $W^{1,1}(\Omega)$ o espaço de Sobolev de $(n-1)$-formas w satisfazendo*

(a) w é ACL em Ω, e

(b) $dw \in L^1(\Omega)$

$W^{1,1}(\Omega)$ é o espaço natural de formas as quais a fórmula de Green verifica-se para sub-regiões de Ω. Nesse ponto estamos aptos a enunciar uma versão do teorema de Gauss-Green com significado lógico.

Teorema 3.2.3 (Teorema de Gauss-Green). *Seja $n-1 < d \leq n$. Se $w \in F^d \cap W^{1,1}(\Omega)$, e Ω é um domínio de Jordan no $\mathbb{R}^n$ tal que $\partial\Omega$ é d-somável, então $\int_{\partial\Omega} w = \int_{\Omega} dw$*

Demonstração. Seja $\widetilde{W}$ a decomposição de Whitney de Ω, então $\int_{\Omega} dw = \lim \int_{\partial \mathsf{W}_k} w$.

Como $w \in W^{1,1}(\Omega)$ temos, para todo cubo de Whitney Q, $\int_{Q} w = \int_{\partial Q} dw$ pelos argumentos padrões via teorema fundamental do cálculo.

Portanto $\int_{\mathsf{W}_k} dw = \int_{\partial \mathsf{W}_k} w$.

Agora pelo teorema da convergência dominada de Lebesgue o lado esquerdo acima tende a $\int_{\Omega} dw$. $\square$

4 FORMULAÇÃO E RESOLUÇÃO DO PROBLEMA

Voltamos agora à situação abordada na introdução, onde uma biomacromolécula ocupa uma região compacta $\bar{K}$ do $\mathbb{R}^2$ ou do $\mathbb{R}^3$. A macromolécula está imersa em um solvente e, como já vimos, altamente carregada, com uma distribuição (espacial) de cargas em ∂K.

O problema (1.2) a (1.5) será estudada na sua forma variacional. Serão discutidas questões referentes à existência e unicidade de soluções, utilizando aspectos da teoria sumarizada nos capítulos anteriores. A formulação variacional leva-nos à minimização de um funcional, considerado no espaço de Hilbert $W_0^{1,2}(D)$. Isso é natural em vista de que não é evidente a existência de uma solução clássica para o problema, exceto para geometrias especiais (Fogolari et al. [16]). Como já afirmamos na introdução desse trabalho, utilizaremos métodos diferentes de resolução para os casos bi e tridimensionais.

O capítulo divide-se em duas seções: A primeira trata da formulação do problema e a segunda discute e estabelece a existência e unicidade de soluções.

4.1 Formulação do Problema

Considere $S \subset \mathbb{R}^2$ (ou $\mathbb{R}^3$), S uma região fechada com uma densidade de cargas $\rho(x)$. O campo elétrico E devido a ρ num ponto $x \in \mathbb{R}^2$ (ou $\mathbb{R}^3$) é dado por

$$E(x) = -\nabla \left(\int_S \frac{\rho(x')}{|x - x'|} dx' \right),$$

onde a integral acima representa o potencial elétrico $\phi(x)$ em x.

Definimos deslocamento elétrico como $D(x) = \epsilon(x)E(x)$, onde $\epsilon(x)$ é a chamada constante dielétrica ou permissividade elétrica relativa de S. Essencialmente ϵ fornece uma medida da resposta da região a um campo elétrico. Tratando S como um dielétrico uniforme podemos considerá-lo como uma constante.

Assim, da teoria eletrostática clássica,

$$\epsilon\Delta\phi(x) = -4\pi\rho(x).$$

Essa última equação é denominada a equação de Poisson (detalhes em Jackson [27]). Em especial, se S representa um condutor carregado com uma densidade de cargas ρ concentradas apenas na superfície, o potencial ϕ no interior do condutor é constante e isso implica que $\epsilon\Delta\phi(x) = 0$ nesse local.

Se uma partícula carregada está sob a ação de um campo elétrico E gerado por uma distribuição de cargas ρ, lembramos que o potencial elétrico na partícula multiplicado pela soma das cargas de ρ fornece a energia necessária para deslocar a partícula sobre o campo.

Para a situação em questão, onde a biomacromolécula ocupa a região compacta $\bar{K}$, o potencial eletrostático em $D\backslash\bar{K}$ pode ser determinado via a equação de Poisson

$$k_2\Delta\phi_2 = -4\pi\rho, \tag{4.1}$$

onde ρ é a densidade de cargas total em $D\backslash\bar{K}$.

Também observamos que o potencial ϕ_1 em K deve, claramente, satisfazer a equação de Laplace

$$k_1\Delta\phi_1 = 0 \tag{4.2}$$

e, é possível garantir, pela característica conservativa do campo eletrostático, a seguinte condição de transmissão (ver, por exemplo, Colton e Kress [10], Magid [37] ou Dautray e Lions [12])

$$\phi_1 = \phi_2 \qquad em \quad \partial K. \tag{4.3}$$

Uma outra condição de fronteira sobre a função potencial eletrostático é, no contexto de superfícies com fronteira regular (ver Jackson [27]),

$$(k_1\nabla\phi_1 - k_2\nabla\phi_2).n = 4\pi\sigma \qquad em \quad \partial K, \tag{4.4}$$

onde n é a normal unitária exterior a ∂K e σ é a densidade superficial de carga. Isso nos sugere, na linguagem de formas diferenciais, a seguinte condição

$$*d(k_1\phi_1 - k_2\phi_2) = 4\pi w \qquad em \quad \partial K, \tag{4.5}$$

onde $*d(k_1\phi_1 - k_2\phi_2)$ é a forma adjunta de $d(k_1\phi_1 - k_2\phi_2)$ e w é alguma 1-forma (2-forma no caso $n = 3$) associada à densidade de cargas em ∂K. A condição (4.5) é razoável no contexto de regiões com fronteira d-somável, já que as decomposições de Whitney para as regiões K e $D\backslash\bar{K}$ são bem definidas e aproximam a região arbitrariamente. Entretanto é necessária uma interpretação no sentido generalizado, como será visto ainda nessa seção.

Observamos que, em situações biológicas, a macromolécula não é imersa num solvente puro, em geral este contém um sal. Se o poli-íon tem carga $Q = Ze^-$ (aqui e^- é a carga do elétron), em solução há Z contra-íons. O número total de íons e contra-íons livres no solvente são aqueles provenientes do sal.

A questão da localização dos íons no solvente é de vital importância mas não é tão simples (Fogolari et al. [16]). De fato alguns íons são visíveis em cristais, mas em geral, esse não é o caso. Um modelo padrão devido a Debye-Hückel (Grosberg e Khochlov [23]), fornece uma estimativa para a distribuição de concentração de íons móveis em $D\backslash\bar{K}$ em função do potencial ϕ_2 de acordo com a distribuição de Boltzmann

$$c_i(x) = c_i^0 \exp[-ez_i\phi_2/T],$$

onde o índice i enumera o tipo de íon, ez_i é a carga do íon do tipo i e c_i^0 é a densidade total de íons do tipo i, T é a temperatura e e é a carga do elétron.

O total de densidade de carga de todos os íons móveis é igual a

$$\rho = \sum_i ez_ic_i(x).$$

Essencialmente esse modelo nos diz que íons carregados positivamente concentram-se em regiões de potencial negativo e vice-versa.

Vamos tratar do caso envolvendo somente dois tipos de íons móveis com cargas opostas e mesma concentração, isto é, $z_1 = 1$, $z_2 = -1$, $c_1^1 = c_2^0 = n/2$, onde n é a concentração total de íons móveis. Dessa forma

$$\rho = -ne\sinh(\frac{e\phi_2(x)}{T}). \tag{4.6}$$

Colocando $\psi_2 = \frac{\phi_2 e}{T}$, obtemos de (4.1) e (4.6),

$$\Delta\psi_2 = r_D^{-2}\sinh\psi_2(x) \qquad em \quad D\backslash\bar{K}, \tag{4.7}$$

onde $r_D^{-2} = \frac{4\pi ne^2}{k_2 T}$ é o raio de Debye (Landau e Lifschitz [33]).

A equação (4.7) combinando as equações de Poisson e a distribuição de Boltzmann é referida na literatura como a equação de Poisson-Boltzmann.

Utilizando-a, juntamente com (4.2), (4.5), a condição de transmissão (4.3) e colocando $\psi_1 = \frac{\phi_1 e}{T}$ obtemos o seguinte problema

$$\begin{aligned}
k_2\Delta\psi_2 &= k_2 r_D^{-2}\sinh\psi_2(x) \quad && em \quad D\backslash\bar{K}, && (4.8)\\
k_1\Delta\psi_1 &= 0 && em \quad K, && (4.9)\\
\psi_2 &= \psi_1 && em \quad \partial K, && (4.10)\\
\psi &= 0 && em \quad \partial D, && (4.11)\\
*d(k_1\psi_1 - k_2\psi_2) &= \frac{4\pi e}{T}w && em \quad \partial K. && (4.12)
\end{aligned}$$

No sentido de obtermos a formulação variacional para o problema determinado por (4.8) a (4.12), realizando o produto interno de (4.8) e (4.9) com $\psi' = (\psi_1', \psi_2')$, obtemos

$$k_2\int_{D\backslash\bar{K}}\psi_2'\Delta\psi_2 dx + k_1\int_K \psi_1'\Delta\psi_1 dx - k_2\int_{D\backslash\bar{K}}(r_D^{-2}\sinh\psi_2)\psi_2' dx = 0.$$

Podemos então estabelecer, via integração por partes, que

$$\begin{aligned}
&- k_2\int_{D\backslash\bar{K}}\nabla\psi_2'\nabla\psi_2 dx - k_1\int_K\nabla\psi_1'\nabla\psi_1 dx + \frac{4\pi e}{T}\int_{\partial K}\gamma\psi' w + \\
&- k_2\int_{D\backslash\bar{K}}(r_D^{-2}\sinh\psi_2)\psi_2' dx = 0,
\end{aligned} \tag{4.13}$$

onde, supomos a existência do traço $\gamma\psi_1 = \gamma\psi_2$ e $\gamma\psi_1' = \gamma\psi_2' = \gamma\psi'$ em ∂K. Queremos encontrar $\psi \in W_0^{1,2}(D)$ tal que (4.13) verifique-se para todo $\psi' \in C_0^\infty(D)$.

É necessária uma interpretação de (4.13). De fato esse problema é equivalente a (4.8) a (4.12) se pudermos interpretar a condição de fronteira (4.12) num sentido generalizado. Para isso, consideramos o espaço de Hilbert $L^2(D)$ e a forma sesquilinear (caso real)

$$a(u,v) = k_1 \int_K \nabla u_1 \nabla v_1 dx + k_2 \int_{D\setminus\bar{K}} \nabla u_2 \nabla v_2 dx - \frac{4\pi e}{T} \int_\Sigma \gamma v\, w, \tag{4.14}$$

tal que $D(a) = \{u, v \in W_0^{1,2}(D), u_1 = u|_K, u_2 = u|_{D\setminus\bar{K}}, v_1 = v|_K, v_2 = v|_{D\setminus\bar{K}}\}$. Aqui utilizamos a notação $\Sigma = \partial K$.

Dessa forma a é densamente definida. Como é facilmente verificável, em decorrência do resultado de traço (2.1.3) e da estimativa (4.36) (Seção 4.2.1), a é fechada. A coercividade de a pode ser mostrada como em (4.40) (Seção 4.2). De acordo com o Teorema 2.2.1, há um operador A_T, $D(A_T) \subset W_0^{1,2}(D)$ tal que

$$a(u,v) = (A_T u, v),$$

para todo $u \in D(A_T)$ e $v \in D(a)$.

Consideremos o problema

$$a(u,v) = (f,v), \tag{4.15}$$

$\forall v \in C_0^\infty(D)$, onde f é tal que

$$f = f_1 \qquad em \quad K \tag{4.16}$$

$$f = f_2 \qquad em \quad D\setminus\bar{K} \tag{4.17}$$

e $u \in W_0^{1,2}(D)$.

Observamos que (4.15) é equivalente a

$$(f,v) = (A_T u, v). \tag{4.18}$$

Escolhendo $v = (v_1, v_2)$, $v \in C_0^\infty(D)$, tal que $v_1 \in C_0^\infty(K)$ e $v_2 \in C_0^\infty(D\backslash\bar{K})$, claramente

$$(f_1, f_2) = (-k_1\Delta u_1, -k_2\Delta u_2). \tag{4.19}$$

Da continuidade do operador traço, $u_1 = u_2$ em Σ.

Vamos mostrar que (4.13) e (4.15) implicam a condição generalizada

$$\lim_{(n,m)\to\infty}\left(\int_{\partial \mathsf{W}_n(K)} *d(k_1u_1)v_1 - \int_{\partial \mathsf{W}_m(D\backslash\bar{K})} *d(k_2u_2)v_2\right) = \frac{4\pi e}{T}\int_\Sigma \gamma v\ w,$$

onde $\mathsf{W}_n(K)$ e $\mathsf{W}_m(D\backslash\bar{K})$ representam seqüências como em (3.3) obtidas da decomposição de Whitney das regiões K e $D\backslash\bar{K}$, respectivamente.

De fato, como a soma de Whitney de cada região é finita, da Proposição 3.1.2, $\mathsf{W}_n(K) \to K$ e $\mathsf{W}_m(D\backslash\bar{K}) \to D\backslash\bar{K}$, com $n, m \to \infty$. Além do mais,

$$\begin{aligned} k_1\int_{\mathsf{W}_n(K)} \nabla u_1\nabla v_1 dx &= -k_1\int_{\mathsf{W}_n(K)} \Delta u_1 v_1 dx + k_1\int_{\partial\mathsf{W}_n(K)} *du_1\ \gamma v_1 \\ k_2\int_{\mathsf{W}_m(D\backslash\bar{K})} \nabla u_2\nabla v_2 dx &= -k_2\int_{\mathsf{W}_m(D\backslash\bar{K})} \Delta u_2 v_2 dx - k_2\int_{\partial\mathsf{W}_m(D\backslash\bar{K})} *du_2\ \gamma v_2, \end{aligned}$$

onde tomamos a normal interior a $D\backslash\bar{K}$. Utilizando (4.14), (4.15), (4.19) e as igualdades acima, obtemos

$$\begin{aligned} (f, v) &= \lim_{(m,n)\to\infty}\left(k_1\int_{\mathsf{W}_n(K)} \nabla u_1\nabla v_1 dx + k_2\int_{\mathsf{W}_m(D\backslash\bar{K})} \nabla u_2\nabla v_2 dx\right) + \\ &- \frac{4\pi e}{T}\int_\Sigma \gamma v\ w \\ &= \lim_{(m,n)\to\infty}\left(-k_1\int_{\mathsf{W}_n(K)} \Delta u_1 v_1 dx - k_2\int_{\mathsf{W}_m(D\backslash\bar{K})} \Delta u_2 v_2 dx\right) + \\ &+ \lim_{(m,n)\to\infty}\left(k_1\int_{\partial\mathsf{W}_n(K)} *du_1\ \gamma v_1 - k_2\int_{\partial\mathsf{W}_m(D\backslash\bar{K})} *du_2\ \gamma v_2\right) + \\ &- \frac{4\pi e}{T}\int_\Sigma \gamma v\ w \\ &= (f, v) + \lim_{(m,n)\to\infty}\left(k_1\int_{\partial\mathsf{W}_n(K)} *du_1\ \gamma v_1 - k_2\int_{\partial\mathsf{W}_m(D\backslash\bar{K})} *du_2\ \gamma v_2\right) + \\ &- \frac{4\pi e}{T}\int_\Sigma \gamma v\ w. \end{aligned}$$

Isso estabelece o resultado.

4.2 Existência e Unicidade de Soluções

4.2.1 Caso Bidimensional

Nessa seção mostraremos a existência e unicidade de soluções para (4.13) no caso bidimensional, via um problema minimizante, utilizando resultados dos Capítulos 2 e 3. Para isso consideremos $1 < d < 2$ e supomos que $w \in F^d \cap W^{1,1}(D \backslash \partial K)$ (Definições 3.1.16 e 3.2.3) e que $D \backslash \bar{K}$ e K são domínios de Jordan no $\mathbb{R}^2$ tal que ∂K é d-somável (o que é o caso se $d > dim_B(\partial K) = s$).

O problema (4.13) sugere considerarmos o funcional

$$A(\psi) = \frac{k_1}{2} \int_K |\nabla \psi_1|^2 dx + \frac{k_2}{2} \int_{D \backslash \bar{K}} |\nabla \psi_2|^2 dx + k_2 r_D^{-2} \int_{D \backslash \bar{K}} (\cosh \psi_2 - 1) dx - \frac{4\pi e}{T} \int_{\partial K} \gamma \psi w,$$

junto com o problema variacional

$$\inf_{\psi \in W_0^{1,2}(D)} A(\psi). \tag{4.20}$$

Aqui $\psi_1 = \psi|_K$, $\psi_2 = \psi|_{D \backslash \bar{K}}$.

Mostraremos que

(i) $A(\psi)$ é fracamente coercivo em $W_0^{1,2}(D)$;

(ii) $A(\psi)$ é fracamente semi-contínuo inferior em $W_0^{1,2}(D)$;

(iii) $A(\psi)$ é Gateaux diferenciável em $W_0^{1,2}(D)$.

Sob essas condições podemos aplicar o Teorema 2.2.4 e Corolário 2.2.1 para garantir que

$$c = \inf_{\psi \in W_0^{1,2}(D)} A(\psi) \tag{4.21}$$

é finito e esse valor é atingido num ponto $\psi^0 \in W_0^{1,2}(D)$, onde

$$A'(\psi^0) = 0.$$

Observamos que $W_0^{1,2}(D)$ é reflexivo e claramente convexo (Adams [2]).

Um cálculo simples garante que, se ψ^0 é solução de (4.20), o par (ψ_1^0, ψ_2^0) satisfaz (4.13), com $\psi^{0'} = (\psi_1^{0'}, \psi_2^{0'})$, $\psi^{0'} \in C_0^\infty(D)$ arbitrário. Dessa forma $\psi^0 = (\psi_1^0, \psi_2^0)$ satisfaz (4.8) a (4.12).

Colocando $\psi = \psi' = \psi^0$ em (4.13) vemos que

$$\begin{aligned} &- k_1 \int_K |\nabla \psi_1^0|^2 dx - k_2 \int_{D\setminus\bar{K}} |\nabla \psi_2^0|^2 dx + \frac{4\pi e}{T} \int_{\partial K} \gamma \psi^0 w + \\ &- k_2 \int_{D\setminus\bar{K}} (r_D^{-2} \sinh \psi_2^0) \psi_2^0 dx = 0. \end{aligned} \tag{4.22}$$

Apresentaremos agora uma série de resultados que vão nos garantir a validade das condições (i), (ii) e (iii) acima para $A(\psi)$.

Começamos definindo uma medida μ em ∂K da seguinte forma

$$\mu(\Delta) = \int_{\Delta \subset \partial K} w \tag{4.23}$$

com respeito aos conjuntos de Borel $\Delta \subset \partial K$. Uma hipótese necessária é que μ definida como acima seja *doubling* (conforme Definição 2.1.3). Tratando ∂K como um espaço métrico munido de μ valida-se o Teorema 2.1.2.

A existência dos operadores (2.9) e (2.10) é garantida pelo seguinte lema

Lema 4.2.1. *Suponha que $K \subset \mathbb{R}^n$ é um domínio de Jordan, $\bar{K}$ é compacto e $dim_B(\partial K) = s$ $(n-1 < s < n)$. Consideremos a existência de uma medida de Borel como em (4.23), com $w \in W^{1,1}(K) \cap F^d$. Então $\forall x \in \mathbb{R}^n$ e $R > 0$, tal que $B(x,R) \cap K \neq \emptyset$, existe $C > 0$ tal que $\mu(\partial(B(x,R) \cap K)) \leq C\ R^d$, para todo d tal que $s < d < n$.*

Demonstração. Pela Proposição 3.1.1, ∂K é d-somável, $\forall d > s$.

Em geral, para uma bola $B \subset \mathbb{R}^n$, temos $dim_B\ \partial B = n - 1$, e isso mostra que ∂B é d-somável se $d > n - 1$.

Consideremos a bola $B(x,R)\subset\mathbb{R}^n$ satisfazendo as hipóteses do lema e $\widetilde{W}=\bigcup_{j=k_0}^{\infty}W^j$ a decomposição de Whitney da região $B(x,R)\cap K$. A fronteira $\partial(B(x,R)\cap K)$ é d-somável ($d>s>n-1$), logo, pela Proposição 3.1.2, $\exists(B(x,R)\cap K)^\flat\equiv\lim W_k=\overline{B(x,R)\cap K}$ em Ξ_d.

Se $w\in F^d\cap W^{1,1}(K)$ é uma $(n-1)$-forma-$(n-1)$ mensurável então

$$\int_{\partial(B(x,R)\cap K)} w \equiv \int^\flat_{\partial((B(x,R)\cap K)^\flat)} w = \lim\int_{\partial W_k} w.$$

Das Definições 3.1.15 e 3.1.16, podemos estabelecer que

$$\left|\int_{\partial W_k} w\right| \le |\partial W_k|_d |w|^d. \tag{4.24}$$

Agora, $\partial W_k\in P_{n-1}$, $\forall k$. De (3.2),

$$\begin{aligned}|\partial W_k|_d < M_d(W_k) &= \inf\Sigma_i|a_i^{(k)}||\sigma_i^{(k)}|^d\\ &\le \Sigma|a_i^{(k)}|(\frac{\sqrt{n}}{2^k})^d\\ &\le \Sigma_i|a_i^{(k)}|(2R)^d\le C_1R^d,\end{aligned}$$

onde $C_1=C_1(N(k))$, $N(k)$ é o número de k-cubos de Whitney para a região K.

Assim, em decorrência de (4.24),

$$\left|\int_{\partial W_k} w\right|\le|\partial W_k|_d|w|^d<C_1R^d|w|^d.$$

Considerando que $\partial(B(x,R)\cap K)$ é d-somável e $w\in F^d$, da Definição 3.1.16 e do Lema 3.1.2, C_1 e $|w|^d$ permanecem limitados para $k\to\infty$. Assim

$$\left|\int_{\partial W_k} w\right|\to\left|\int_{\partial(B(x,R)\cap K)} w\right|\le Const(C_1,w)R^d,\qquad quando\quad k\to\infty$$

para todo $R>0$. $\square$

A seguir mostraremos que $\int_{D\setminus\bar{K}}\cosh\psi_2dx$ é bem definido quando $\psi\in W^{1,2}(D)$.

Lema 4.2.2. *Sejam D um domínio no $\mathbb{R}^2$, ∂D regular, e $\bar{K}$ um subconjunto compacto de D tal que ∂K é d-somável ($1 < d < 2$). Se $\psi \in W^{1,2}(D)$, então a seguinte inequação é válida*

$$\int_{D\backslash\bar{K}} |\psi_2 - \bar{\psi}_2|^{2m} dx \leq const(D\backslash\bar{K}) C^{4m} (4m)^{\frac{1}{2}+m} \|\psi_2\|_{1,2}^{2m} \Lambda^{1-m}, \tag{4.25}$$

onde $\Lambda = area(D\backslash\bar{K})$, C é uma constante que não depende de m e $m \geq 1$. Aqui $\psi_2 = \psi|_{D\backslash\bar{K}}$.

Demonstração. Segue da seguinte modificação na prova da desigualdade de Trudinger, vista em Hajlasz e Koskela [25] (Teorema 6.1).

Assumimos as hipóteses lá estabelecidas para o espaço métrico (X, ρ), com $X = \mathbb{R}^2$ e $\rho = \max(|x_1 - x_2|, |y_1 - y_2|)$, onde (x_1, y_1), $(x_2, y_2) \in \mathbb{R}^2$. Também assumimos que μ é a medida de Lebesgue em X. Portanto a inequação de Poincaré (2.15) é válida para toda bola $B \subset D\backslash\bar{K} \subset (X, \rho)$.

De um argumento que utiliza propriedades métricas (condição de cadeia), obtemos a estimativa

$$\int_B^* |\psi_2 - \bar{\psi}_2|^{q/2} dx \leq C^q q^{\frac{1}{2}+\frac{q(s-1)}{2s}} \left(r^s \int_{5\sigma B}^* |\nabla\psi_2|^s dx \right)^{\frac{q}{2s}}, \tag{4.26}$$

válida para toda bola $B(x, r) \subset D\backslash\bar{K} \subset (X, \rho)$ e todo $\sigma \geq 1$, $x \in D\backslash\bar{K}$, $s > 1$, $q > \max(s, \frac{s}{s-1})$. Aqui C é uma constante que não depende de q.

Consideremos agora a decomposição de Whitney $\widetilde{W}$ de $D\backslash\bar{K}$. Seja k' o menor inteiro não negativo tal que o k'-cubo Q tenha a propriedade $5Q \subset D\backslash\bar{K}$. Nesse caso, escolhendo $\sigma = 1$ em (4.26), podemos estabelecer

$$\begin{aligned} \int_Q^* |\psi_2 - \bar{\psi}_2|^{q/2} dx &\leq C^q q^{\frac{1}{2}+\frac{q(s-1)}{2s}} \left(2^{-k's} \int_{5Q}^* |\nabla\psi_2|^s dx \right)^{\frac{q}{2s}} \\ &\leq C^q q^{\frac{1}{2}+\frac{q(s-1)}{2s}} \left(2^{-k's} \int_{D\backslash\bar{K}}^* |\nabla\psi_2|^s dx \right)^{\frac{q}{2s}} \end{aligned} \tag{4.27}$$

Naturalmente (4.27) é válida também para todo k-cubo com $k \geq k'$.

Para o caso em que $k < k'$, colocando $k = k' - p$, e denominando $N(k)$ como o número total de k-cubos contidos em $D\backslash\bar{K}$, então

$$N(k) = 4^p N(k').$$

Dessa forma, para um k-cubo Q com $k < k'$, (4.27) fornece

$$\int_Q^* |\psi_2 - \bar{\psi}_2|^{q/2} dx \leq 4^p N(k') C^q q^{\frac{1}{2}+\frac{q(s-1)}{2s}} \left(2^{-k's} \int_{D\backslash K}^* |\nabla\psi_2|^s dx \right)^{\frac{q}{2s}} \tag{4.28}$$

Do fato que ∂K é d-somável e ∂D é regular, a soma

$$\sum_{Q\in\widetilde{W}} |Q|^d$$

é finita (Lema 3.1.2). Portanto, de (4.27) e (4.28),

$$\sum_{Q\in\widetilde{W}} \int_Q^* |\psi_2 - \bar{\psi}_2|^{q/2} dx \leq \sum_{k=k_0}^{k'-1} 4^{k'-k} N(k') C^q q^{\frac{1}{2}+\frac{q(s-1)}{2s}} \left(2^{-ks} \int_{D\backslash K}^* |\nabla\psi_2|^s dx \right)^{\frac{q}{2s}}$$
$$+ C^q q^{\frac{1}{2}+\frac{q(s-1)}{2s}} \sum_{Q\in\widetilde{W}(k\geq k')} \left(2^{-ks} \int_{D\backslash K}^* |\nabla\psi_2|^s dx \right)^{\frac{q}{2s}} < \infty.$$

Sem falta de generalidade podemos supor $k_0 \geq 1$ e isso imediatamente nos permite concluir que

$$\sum_{Q\in\widetilde{W}} \int_Q^* |\psi_2 - \bar{\psi}_2|^{q/2} dx \leq [(k'-k_0)4^{k'} N(k')+1] C^q q^{\frac{1}{2}+\frac{q(s-1)}{2s}} \sum_{Q\in\widetilde{W}} |Q|^d \left(\int_{D\backslash K}^* |\nabla\psi_2|^s dx \right)^{\frac{q}{2s}},$$

para $q \geq 4$ e $1 < d \leq 2$.

Conforme Proposição 3.1.2, $\lim W_k \equiv (D\backslash\bar{K})^\flat$ existe, logo

$$\lim_{k\to\infty} \int_{W_k}^* |\psi_2 - \bar{\psi}_2|^{q/2} dx \equiv \int_{D\backslash\bar{K}}^* |\psi_2 - \bar{\psi}_2|^{q/2} dx$$
$$\leq const(D\backslash\bar{K}) C^q q^{\frac{1}{2}+\frac{q(s-1)}{2s}} \left(\int_{D\backslash K}^* |\nabla\psi_2|^s dx \right)^{\frac{q}{2s}},$$

o que estabelece a validade de

$$\int_{D\backslash\bar{K}} |\psi_2 - \bar{\psi}_2|^{q/2} dx \leq const(D\backslash\bar{K}) C^q q^{\frac{1}{2}+\frac{q(s-1)}{2s}} \|\nabla\psi_2\|_{0,s}^{q/2} \Lambda^{1-\frac{q}{2s}}, \tag{4.29}$$

para todo $q \geq 4$ e $s > 1$.

Escolhendo $s = 2$ em (4.29) e colocando $\widetilde{\psi_2} = \psi_2 - \bar{\psi}_2$ obtemos, para todo $q = 4m$, $m \geq 1$,

$$\begin{aligned}\int_{D\backslash\bar{K}} |\widetilde{\psi_2}|^{2m} dx &\leq const(D\backslash\bar{K}) C^{4m} (4m)^{\frac{1}{2}+m} \|\nabla\psi_2\|_{0,2}^{2m} \Lambda^{1-m} \\ &\leq const(D\backslash\bar{K}) C^{4m} (4m)^{\frac{1}{2}+m} \|\psi_2\|_{1,2}^{2m} \Lambda^{1-m}.\end{aligned} \tag{4.30}$$

□

A partir desse resultado, escrevendo

$$\int_{D\backslash\bar{K}} \cosh\psi_2 dx = \int_{D\backslash\bar{K}} \cosh(\widetilde{\psi_2} + \bar{\psi}_2) dx \tag{4.31}$$

e

$$\begin{aligned}\cosh(\widetilde{\psi_2} + \bar{\psi}_2) &= \cosh\widetilde{\psi_2}\ \cosh\bar{\psi}_2 + \sinh\widetilde{\psi_2}\ \sinh\bar{\psi}_2 \\ &= (\cosh\widetilde{\psi_2} - 1)\ \cosh\bar{\psi}_2 + \cosh\bar{\psi}_2 + \sinh\widetilde{\psi_2}\ \sinh\bar{\psi}_2,\end{aligned} \tag{4.32}$$

e observando que

$$\int_{D\backslash\bar{K}} (\cosh\widetilde{\psi_2} - 1) dx = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\int_{D\backslash\bar{K}} \widetilde{\psi_2}^{2m} dx}{(2m)!},$$

a estimativa (4.25) com $m \geq 1$ inteiro não negativo e a fórmula de Stirling $p! \sim \sqrt{2\pi} p^{p+1/2} e^{-p}$, nos mostram que

$$\begin{aligned}\int_{D\backslash\bar{K}} \widetilde{\psi_2}^{2m} dx &\leq \frac{const(D\backslash\bar{K}) C^{4m} \|\psi_2\|_{1,2}^{2m} (2m)^{\frac{1}{2}+m} (2m)^m 2^{\frac{1}{2}+m} \Lambda^{1-m}}{(2m)^m} \\ &\leq \frac{const(D\backslash\bar{K}) C^{4m} \|\psi_2\|_{1,2}^{2m} (2m)^{\frac{1}{2}+2m} 2^{\frac{1}{2}+m} \Lambda^{1-m}}{2^m m!} \\ &\sim \frac{const(D\backslash\bar{K}) C^{4m} \|\psi_2\|_{1,2}^{2m} (2m)! \Lambda^{1-m} e^{2m}}{\sqrt{\pi} m!}.\end{aligned}$$

Portanto,

$$\begin{aligned}\sum_{m=1}^{\infty} \frac{\int_{D\backslash\bar{K}} \widetilde{\psi_2}^{2m} dx}{(2m)!} &\leq \sum_{m=1}^{\infty} \frac{const(D\backslash\bar{K}) C^{4m} \|\psi_2\|_{1,2}^{2m} \Lambda^{1-m} e^{2m}}{\sqrt{\pi} m!} \\ &= \sum_{m=1}^{\infty} \frac{const(D\backslash\bar{K}) \Lambda}{\sqrt{\pi} m!} \left(\frac{C^4 \|\psi_2\|_{1,2}^2 e^2}{\Lambda} \right)^m \\ &\leq \frac{const(D\backslash\bar{K}) \Lambda}{\sqrt{\pi}} \exp\left(\frac{C^4 \|\psi_2\|_{1,2}^2 e^2}{\Lambda} \right).\end{aligned} \tag{4.33}$$

Via desigualdade de Hölder, obtemos

$$\int_{D\setminus\bar{K}} \psi_2 dx \leq \Lambda^{1/2} \|\psi_2\|_{1,2},$$

e assim

$$\begin{aligned}
\int_{D\setminus\bar{K}} \cosh \bar{\psi}_2 dx &= \int_{D\setminus\bar{K}} \cosh |\bar{\psi}_2| dx \\
&\leq \int_{D\setminus\bar{K}} \exp |\bar{\psi}_2| dx \\
&\leq \int_{D\setminus\bar{K}} \exp (\Lambda^{-\frac{1}{2}} \|\psi_2\|_{1,2}) dx \\
&= \Lambda \exp (\Lambda^{-\frac{1}{2}} \|\psi_2\|_{1,2}).
\end{aligned} \tag{4.34}$$

Além disso,

$$\begin{aligned}
\int_{D\setminus\bar{K}} (\cosh \widetilde{\psi_2} - 1) \cosh \bar{\psi}_2 dx &\leq \frac{const(D\setminus\bar{K})\Lambda}{\sqrt{\pi}} \cosh \bar{\psi}_2 \exp\left(\frac{C^4 \|\psi_2\|_{1,2}^2 e^2}{\Lambda}\right) \\
&\leq \frac{const(D\setminus\bar{K})\Lambda}{\sqrt{\pi}} \exp\left(\frac{C^4 \|\psi_2\|_{1,2}^2 e^2}{\Lambda}\right) \times \\
&\times \exp\left(\Lambda^{-\frac{1}{2}} \|\psi_2\|_{1,2}\right).
\end{aligned} \tag{4.35}$$

Devido ao fato que

$$\int_{D\setminus K} \sinh \widetilde{\psi_2} dx \leq \int_{D\setminus K} \cosh \widetilde{\psi_2} dx,$$

à (4.32) e às estimativas (4.33), (4.34) e (4.35), (4.31) é bem definido e limitado para $\|\psi\|_{1,2}$ limitado.

Agora, do Teorema 2.1.3,

$$\|\gamma\psi\|_{L^\tau(\partial K,\mu)} \leq \ C \ \|\psi\|_{W_0^{1,2}(D)}$$

com $\tau = \frac{d}{1-\lambda}$, $1 < d < 2$ e $0 < \lambda < \frac{1}{2}$.

Segue-se que

$$\left| \int_{\partial K} \gamma\psi \ d\mu \right| \leq \mu(\partial K)^{1/\tau'} \|\gamma\psi\|_{L^\tau(\partial K,\mu)} \leq C \ \mu(\partial K)^{1/\tau'} \|\psi\|_{W_0^{1,2}(D)}, \tag{4.36}$$

onde $\frac{1}{\tau} + \frac{1}{\tau'} = 1$.

Colocando $k_0 = \max\{k_1, k_2\}$ obtemos a estimativa

$$\begin{aligned}\left|\frac{k_1}{2}\int_K |\nabla\psi_1|^2 dx + \frac{k_2}{2}\int_{D\setminus\bar{K}} |\nabla\psi_2|^2 dx\right| &\leq k_0 \int_D |\nabla\psi|^2 dx \\ &\leq k_0 \|\psi\|^2_{W_0^{1,2}(D)} \end{aligned} \tag{4.37}$$

Com isso podemos estabelecer que $A(\psi)$ é limitado para $\|\psi\|_{W_0^{1,2}(D)}$ limitado.

Vamos mostrar que $A(\psi)$ é fracamente coercivo.

Inicialmente, da desigualdade (2.14), se $\psi \in W_0^{1,2}(D)$,

$$\|\nabla\psi\|^2_{0,2} \geq c_D \|\psi\|^2_{1,2}. \tag{4.38}$$

Definimos $k = \min\{\frac{k_1}{2}, \frac{k_2}{2}\}$. As desigualdades de Hölder e de Young fornecem

$$\begin{aligned}\left|\frac{4\pi e}{T}\int_{\partial K} \gamma\psi \, d\mu\right| &\leq \frac{k\, c_D \, \|\psi\|^2_{1,2}}{2} + \\ &+ \frac{1}{2}\left(\frac{4Ce\pi\mu(\partial K)^{1/\tau'}}{T\sqrt{kc_D}}\right)^2 . \end{aligned} \tag{4.39}$$

Dessa forma

$$\begin{aligned} A(\psi) &\geq k\|\nabla\psi\|^2_{0,2} - \frac{4\pi e}{T}\int_{\partial K} \gamma\psi \, d\mu \\ &\geq k\, c_D \|\psi\|^2_{1,2} - \frac{k\, c_D}{2}\|\psi\|^2_{1,2} - \frac{1}{2}\left(\frac{4Ce\pi\mu(\partial K)^{1/\tau'}}{T\sqrt{k\, c_D}}\right)^2 \\ &= \frac{k\, c_D}{2}\|\psi\|^2_{1,2} - \frac{1}{2}\left(\frac{4Ce\pi\mu(\partial K)^{1/\tau'}}{T\sqrt{k\, c_D}}\right)^2 \to \infty \end{aligned} \tag{4.40}$$

com $\|\psi\|^2_{1,2} \to \infty$. Se supormos que $\psi \in W^{1,2}(D)$, um argumento utilizando a positividade de $\cosh\psi$ pode ser usado para estabelecer a coercividade de $A(\psi)$, portanto, essa característica é imutável no caso em que ψ é não nulo em ∂D.

Os resultados a seguir implicarão que $A(\psi)$ é fracamente sequencialmente semicontínuo inferiormente.

Primeiro reiteramos que $A(u)$ é um funcional em $V = W_0^{1,2}(D)$ da forma $J(u)$ como em (2.19), onde,

$$a(u,v) = k_1 \int_K \nabla u_1 \nabla v_1 dx + k_2 \int_{D\setminus\bar{K}} \nabla u_2 \nabla v_2 dx, \tag{4.41}$$

$$j(u) = k_2 r_D^{-2} \int_{D\setminus\bar{K}} (\cosh u_2 - 1) dx \quad e \tag{4.42}$$

$$L(u) = \frac{4\pi e}{T} \int_{\partial K} \gamma u \; d\mu. \tag{4.43}$$

Claramente $a(u,v)$ é uma forma bilinear simétrica e positiva em $V \times V$. Da estimativa (4.37), é também limitada. Dessa forma, utilizando o Teorema 2.2.7, $a(u,u)$ é sequencialmente fracamente semicontínua inferiormente em $V \times V$.

Através do lema abaixo vemos que $j(u)$ é contínuo. O lema decorre de uma modificação em resultados de Cherrier [8]

Lema 4.2.3. *Sejam $\bar{M} \subset \mathbb{R}^2$ compacto tal que ∂M é regular e $(\phi_i) \in W^{1,2}(M)$ uma seqüência convergindo fracamente a $\phi \in W^{1,2}(M)$. Então a seqüência $(\exp|\phi_i|)$ é limitada em $L^1(M)$ e existe uma subseqüência (ϕ_{i_k}) tal que $(\exp(|\phi_{i_k})|)$ converge fortemente em $L^1(M)$ para $\exp(|\phi|)$.*

Demonstração. Pelo Lema 2.2.1, (ϕ_i) é limitada em $W^{1,2}(M)$. Dessa forma, o Lema 4.2.2, bem como argumentos similares aos utilizados nas estimativas (4.32), (4.33), (4.34) e (4.35), mostram que $(\exp(|\phi_i|))$ é limitado em $L^1(M)$.

Do fato que $|\nabla|u|| = |\nabla u| \quad q.s.$,

$$\|\nabla \exp(|\phi_i|)\|_{0,1} \leq \|\exp(|\phi_i|)\|_{0,2} \|\nabla \phi_i\|_{0,2} \leq const,$$

ou seja, $(\exp(|\phi_i|))$ é limitado em $W^{1,1}(M)$. Do teorema da imersão compacta de Kondrachov (Adams [2]) podemos extrair uma subseqüência $(\exp(|\phi_{i_k}|))$ fortemente convergente em $L^1(M)$. Claramente, $\|\exp(|\phi_{i_k}|) - \exp(|\phi|)\|_{0,1} \to 0$, com $i \to \infty$. $\square$

Finalmente temos de mostrar que $\frac{4\pi e}{T} \int_{\partial K} \gamma \psi_n \; d\mu$ é seqüencialmente fracamente semicontínuo inferiormente. Isso resulta de propriedades de compacidade decorrentes do Teorema 2.1.5.

Para isso ser evidente inicialmente observamos que, se $\psi_n \rightharpoonup \psi$ em $V = W_0^{1,2}(D)$, $\gamma\psi_n \rightharpoonup \gamma\psi$ em $Y = M^{1,\frac{d}{1-\lambda}}(\partial K, |.|^{1-\lambda}, \mu)$. De fato, se $\gamma : V \to Y$, podemos definir o operador $\gamma' : Y' \to V'$ e assim, $< \psi_n, \gamma' L > \to < \psi, \gamma' L >$, o que implica $< \gamma\psi_n, L > \to < \gamma\psi, L >$, para todo $L \in Y'$.

Assim sendo, pelo Lema 2.2.1 e (2.5), $(\gamma\psi_n)$ é limitada em Y e em $L^1(\partial K, \mu)$, respectivamente. Pelo Teorema 2.1.2 existem $(g_n) \in L^{\frac{d}{1-\lambda}}(\partial K, \mu)$ tal que cada par $(\gamma\psi_n, g_n)$ satisfaz (2.6) para algum $q < \frac{d}{1-\lambda}$. O Teorema 2.1.5 pode então ser aplicado para garantir que $(\gamma\psi_n)$ converge fortemente a $\gamma\psi$ em $L^1(\partial K, \mu)$.

$A(\psi)$ é então sequencialmente fracamente semicontínuo inferiormente. Devido ao Corolário 2.2.1, resta mostrar que $A(\psi)$ é Gateaux-diferenciável.

Isso é claro se observarmos que em vista de (4.36), o funcional linear (4.43) é contínuo. A desigualdade de Hölder aplicada a (4.41) mostra que $a(u, v)$ é contínua. Como já afirmamos, (4.41) e (4.43) são Gateaux-diferenciáveis.

Por sua vez, o funcional (4.42) é Gateaux-diferenciável em $W_0^{1,2}(D)$. Com efeito, para valores pequenos de t, digamos, $0 < t < \delta$ e para $u, h \in W_0^{1,2}(D)$

$$\begin{aligned}
\int_{D\backslash\bar{K}} \left| \frac{\cosh(u_2 + th_2) - \cosh(u_2)}{t} \right| dx &= \int_0^1 \int_{D\backslash\bar{K}} |h_2| |\sinh(u_2 + \theta h_2 t)| dx d\theta \\
&\leq \int_{D\backslash\bar{K}} h_2 \cosh(u_2 + \delta h_2) dx \\
&\leq \left(\int_{D\backslash\bar{K}} |h_2|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_{D\backslash\bar{K}} \cosh^2(u_2 + \delta h_2) dx \right)^{\frac{1}{2}} \\
&= \|h_2\|_{0,2} \, \|\cosh(u_2 + \delta h_2)\|_{0,2},
\end{aligned}$$

onde $u_2 = u|_{D\backslash\bar{K}}$ e $h_2 = h|_{D\backslash\bar{K}}$. Do fato que (4.31) é bem definido e que

$$\frac{\cosh(u + th) - \cosh(u)}{t} \to \sinh u,$$

pontualmente em $x \in D\backslash\bar{K}$ quando $t \to 0$, o teorema da convergência dominada de Lebesgue garante o resultado.

A unicidade da solução para o problema (4.20) segue do Teorema 2.2.5, já que, de acordo com o Teorema 2.2.6, (4.21) pode ser caracterizado como um problema da forma (2.16).

4.2.2 Caso Tridimensional

Como já afirmamos, o método utilizado no caso bidimensional não se aplica em três dimensões. Isso decorre do fato de que o funcional (4.42) pode não ser bem definido quando $u \in W^{1,2}(\Omega)$ e $\Omega \subset \mathbb{R}^3$. Entretanto, podemos restringir o domínio de soluções, caracterizando o problema como em (2.19), (2.24) e (2.25). A existência e unicidade de soluções são então garantidas pelos resultados da Seção 2.2.

É importante observar que a aplicação desse mesmo método no caso bidimensional nos levaria a resultados mais fracos pois, nesse caso, restringiríamos o domínio de soluções para o problema.

Iniciamos observando que o problema

$$\begin{aligned} &- k_1 \int_{D\setminus\bar{K}} \nabla\psi_1'\nabla\psi_1 dx - k_2 \int_{D\setminus\bar{K}} \nabla\psi_2'\nabla\psi_2 dx + \frac{4\pi e}{T}\int_{\partial K} \psi' w + \\ &- k_2 \int_{D\setminus\bar{K}} (r_D^{-2}\sinh\psi_2)\psi_2' dx = 0, \end{aligned} \tag{4.44}$$

onde $\bar{K} \subset D \subset \mathbb{R}^3$, pode ser caracterizado como da forma (2.32) com

$$\begin{aligned} a(u,v) &= k_1 \int_{D\setminus\bar{K}} \nabla u_1 \nabla v_1 dx + k_2 \int_{D\setminus\bar{K}} \nabla u_2 \nabla v_2 dx, \\ L(v) &= \frac{4\pi e}{T}\int_{\partial K} \gamma v w, \\ \phi(u) &= k_2 r_D^{-2}\sinh(u). \end{aligned}$$

Como no caso bidimensional, (2.10) permite uma estimativa similar a (4.36). Também (4.37) é válida. Com isso, o funcional linear $L(.)$ e a forma bilinear $a(.,.)$ acima são limitados para $\|\psi\|_{1,2}$ limitado. Claramente $\phi(.) : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ é não decrescente, $\phi \in C^0(\mathbb{R})$ e $\phi(0) = 0$.

Consideremos agora o funcional $j(.) : L^2(D) \to \mathbb{R}$ como em (2.25), onde

$$\Phi(v) = k_2 r_D^{-2}\int_0^v \sinh(\tau) d\tau$$

Como conseqüência do Corolário 2.2.2, $j(.)$ restrito a $V = W_0^{1,2}(D)$ é seqüencialmente fracamente semi-contínuo inferiormente. Pelo Teorema 2.2.9, (4.13) é equivalente ao problema:

Encontrar $u \in V$ tal que u é a solução de

$$a(u, v-u) + j(v) - j(u) \geq L(v-u), \quad \forall v \in V. \tag{4.45}$$

O Teorema 2.2.8 mostra que (4.45) tem solução única em $D(\Phi) = \{v \in V, \Phi(v) \in L^1(\Omega)\}$.

Observamos que a desigualdade (4.25) em três dimensões requer que $\psi \in W^{1,3}(D)$ e não em $W^{1,2}(D)$, garantindo que $\exp(k\psi)$ é integrável, como no caso bidimensional. Infelizmente, uma tentativa de trabalhar neste sentido leva a problemas, os quais podem ser evitados com o uso forte de monotonicidade e restrição de domínio, como é visto em Glowinski [21]. Nesse mesmo trabalho podemos ver também técnicas de elementos finitos para a obtenção de resultados numéricos. É nossa intenção fazer uso dessas técnicas no presente contexto, utilizando dados experimentais do Protein Data Bank.

BIBLIOGRAFIA

[1] ADAMS, R., *A trace inequality for the generalized potentials.* Studia Math., **48**, (1973), 99-105.

[2] ADAMS, R., *Sobolev Spaces.* Academic Press, New York, 1975.

[3] ALBERTS, B., BRAY, B., LEWIS, J., RAFF, M., ROBERTS, K., WATSON, J.D., *Molecular Biology of the Cell.* Garland, 1994.

[4] ALEXANDROV, A.F., BUGDANKOVICH, A.A., RUKHADZE, A.A., *Principles of Plasma Electrodynamics.* Springer-Verlag, Berlin, 1984.

[5] ANDERSON, J.L., *Colloid Transport by Interfacial Forces.* Ann.Rev.Fluid.Mech., **21**, (1989), 61-69.

[6] ANTOSIEWICS, J., McCAMMON, J.A., GILSON, M.K., *Prediction of pH dependent properties of proteins.* J.Mol.Biol., **238**, (1994), 415-436.

[7] BERGER, M., *Nonlinearity and Functional Analysis.* Academic Press, New York, 1977.

[8] CHERRIER, P., *Cas d'exception du théoremè d'inclusion de Sobolev sur les varietés riemanniennes et applications.* Bull.Scien.Math., **105**, (1981), 235-288.

[9] CLEMMON, P.C., DOUGHERTY, J.P., *Electrodynamics of Particles and Plasmas.* Addison-Wesley Reading, Massachusetts, 1969.

[10] COLTON, D., KRESS, R., *Integral Equations Methods in Scattering Theory.* John Wiley, New York, 1983.

[11] DAUNE, M., *Molecular Biophysics:Structures in Motion.* Oxford University Press, Oxford, 1999.

[12] DAUTRAY, R., LIONS, J.L., *Mathematical Analysis and Numerical Methods for Science and Technology: Functional and Variational Methods, vol.2.* Springer-Verlag, New York, 1985.

[13] EDWARDS, H.M., *Advanced Calculus:A diferential forms approach.* Birhäuser, Boston, 1994.

[14] EVANS, L.C., GARIEPY, R., *Measure Theory and Fine Properties of Functions.* CRC Press, London, 1992.

[15] FALCONER, K., *Fractal Geometry.* Jonh Wiley, New York, 1990.

[16] FOGOLARI, F., ZUCCATO, P., ESPOSITO, G., VIGLINO, P., *Biomolecular Electrostatic with Linearized Poisson-Boltzmann Equation.* Biophysical Journal, **76**, (1999), 1-16.

[17] FOGOLARI, F., BRIGGS, J.M., *On the variational approach to Poisson-Boltzmann.* Chem.Phys.Letters, **81**, (1997), 135-139.

[18] FRANCHI, B., HAJLASZ, P., KOSKELA, P., *Definitions of Sobolev classes on metric spaces.* Max-Planck Inst.Math.Nat.Leipzig, **11**, (1998).

[19] GILBARG, D., TRUDINGER, N. S., *Elliptic Partial Differential Equations of Second Order.* Springer-Verlag, Berlin, 1977.

[20] GIRAULT, V., RAVIART, P.A., *Finite Elements Methods for Navier-Stokes Equation: Theory and Algoritms.* Springer-Verlag, Berlin, 1980.

[21] GLOWINSKI, R., *Numerical Methods for Nonlinear Variational Problems.* Springer-Verlag, New York, 1984.

[22] GREINER, A., NEISE, P., STÖCKER, R., *Thermodynamics and Statistical Mechanics.* Springer-Verlag, New York, 1997.

[23] GROSBERG, A.Yu., KHOKHLOV, A.R., *Statistical Physics of Macromolecules.* AIP Press, New York, 1994.

[24] HAJLASZ, P., MARTIO, O., *Traces of Sobolev functions on fractal types sets and characterization of extension domains.* J.Func.Analysis, **143**, (1997), 221-246.

[25] HAJLASZ, P., KOSKELA, P., *Sobolev met Poincaré.* Memoirs of the American Mathematical Society., **688, vol.145**, (2000).

[26] HARRISON, J., NORTON, A., *The Gauss-Green theorem for fractal boundaries.* Duke J.Math., **67**, (1992), 575-588.

[27] JACKSON, J.D., *Classical Electrodynamics.* John Wiley, New York, 1975.

[28] KATO, T., *Perturbation Theory of Linear Operators.* Springer-Verlag, New York, 1966.

[29] KORNYSHEV, A.A., LEIKEN, S., *Electrostatic interaction between helical macromolecules in dense aggregates:an impetus for DNA poly-and meso-morphism.* Proc.Nat.Acad.Sci., **95**, (1998), 13579-13584.

[30] KUHN, P.S., BARBOSA, M.C., LEVIN, Y., *Effects of hydrophobicity in DNA surfactant complexation.* Physics A, **283**, (2000), 113-118.

[31] KUHN, P.S., LEVIN, BARBOSA, M.C., *Complex formation between poly-electrolytes and ionic surfactants.* Chem.Phys.Letters, **208**, (1998), 51-56.

[32] KUYUCAK, S., HOYLES, M., CHUNG, S.H., *Analytical Solutions of Poisson's Equation for Realistic Geometrical Shapes of Membrane Ion Channels.* Biophysical Journal, **74**, (1998), 22-36.

[33] LANDAU, L.D., LIFSHITZ, E.M., *Statistical Physics.* Perganon Press, Oxford, 1988.

[34] LONG, D., AJDARI, A., *Symmetry Properties of the Electrophoretic Motion of Patterned Colloidal Particles.* Phys.Rev.Letters, **81**, (1998), 1529-1532.

[35] LONG, D., VIORY, J.L., AJDARI, A., *Simultaneous Action of Electric Fields and Noneletric Forces on a Polyelectrolyte: Motion and Deformation.* Phys.Rev.Letters, **76**, (1996), 3858-3861.

[36] LYUBARTSEV, A.P., TANG, J.X., JANMEY, P.A., NORDENSKIÖLD, L., *Electrostatically Induced Polyelectrolyte Associations of Rodlike Vírus Particles.* Phys.Rev.Letters, **998, vol.81, n.24**, (1998), 5465-

[37] MAGID, L.M., *Eletromagnetic Fields, Energy and Waves.* John Wiley, New York, 1972.

[38] MICU, A.M., BAGHERI, B., IDIN, A.V., SCOTT, L.R., PETTIT, B.M., *Numerical Considerations in the Computation of the Electrostatic Free Energy of Interaction within the Poisson-Boltzmann theory.* J.Comp.Phys., **136**, (1997), 203-227.

[39] PECK, E.R., *Eletricity and Magnetism.* Mc Graw-Hill, New York, 1953.

[40] REINER, E.S., RADKE, C.J., *Variational Approach to the Electrostatic Free Energy in Charged Colloidal Suspensions: General Theory for Open Systems.* J.Chem.Society Faraday Trans., **86**, (1990), 3901-3912.

[41] SPRUCK, J., *The elliptic Sinh-Gordon equation and the construction of toroidal soap bubbles.* Lect.Not.Math., **1340**, (1986), 275-301.

[42] STEIN, E., *Singular integrals and differentiability properties of functions.* Princeton University Press, Princeton, 1970.

[43] TEUBNER, M., *The motion of charged colloidal particles in electric fields.* J.Chem.Phys., **76**, (1982), 5564-5573.

[44] TRACY, C.A., WIDOW, A., *On Exact Solutions to the Cylindrical Poisson-Boltzmann Equation with Application to Polyelectrolytes.* Physica A, **244**, (1997), 402-413.

[45] WHITNEY, Z, *Geometric Integration Theory.* Princeton University Press, New Jersey, 1957.

[46] WESTENHOLZ, C.von, *Differential forms in mathematical physics.* Studies in Mathematics and its applications, North-Holland, Amsterdan, 2.ed., 1981.

[47] YOSIDA, K., *Functional Analysis.* 6.ed. Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-NewYork, 1980.

[48] ZEIDLER, E., *Nonlinear Functional Analysis and its Aplications II/A:Linear Monotone Operators.* Springer-Verlag, New York, 1990.

[49] ZEIDLER, E., *Nonlinear Functional Analysis and its Aplications II/B: Nonlinear Monotone Operators.* Springer-Verlag, New York, 1990.

[50] ZIEMER, W.P., *Weakly Differentiable Functions.* Springer-Verlag, Berlin, 1989.